Methoden zur Bestimmung des Umsatzes von Stickstoff, dargestellt für drei pleistozäne Grundwasserleiter Norddeutschlands

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften der Technischen Universität Dresden

von

Christian Konrad,

geboren am 07.05.1976 in Burgstädt

Eingereicht am: 30. November 2006

Verteidigt am: 20.06.2007

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil Wolfgang Walther
Prof. Dr. rer. nat. habil Bernd Ullrich
PD Dr. agr. sc. Reinhard Well

„Es gab keinen Schmerz, keine Freude, keine Erregung, keine Erleichterung, kein Glücksgefühl, keinen Laut und auch kein tiefes Durchatmen. Es war nur das Begreifen einer großen Nutzlosigkeit, oder genauer, ich war nur tiefer in ihr geheimnisvolles Reich eingedrungen.“

Werner Herzog
„Die Eroberung des Nutzlosen“, Hanser 2004.

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand in den Jahren 2004 bis 2006, während ich als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Grundwasserwirtschaft der Technischen Universität Dresden tätig gewesen bin. Im Wesentlichen basiert die Arbeit auf verschiedenen Auftragsarbeiten für drei niedersächsische Wasserverbände. Mein Dank gilt deshalb an erster Stelle Herrn Professor Wolfgang Walther, der durch sein starkes fachliches Interesse an diesem Thema und die gezielte und vorausschauende Akquise dieser Projekte, die vorliegende Arbeit ermöglichte und stets vorbehaltlos unterstützte. Dankbar bin ich Herrn Dr. Reinhard Well für die fachliche Begleitung und Beratung bei den Feld- und Laborversuchen. Professor Bernd Ullrich danke ich für die konstruktiven Hinweise und die Übernahme eines Gutachtens. Besonders möchte ich mich bei Herrn Dr. Joseph Hölscher, Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasser und Küstenschutz, Herrn Schaare und Frau Schmid vom Wasserverband Peine, Herrn Puschmann, Herrn Neuhaus und Herrn Levin vom Wasserverband Sulinger Land, sowie bei Herrn Harms, Herrn Penning und Herrn Sütering vom Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverband, für ihr Vertrauen und die sehr gute Zusammenarbeit bedanken. Überaus angenehm war die Kooperation mit den Mitarbeitern des Ingenieurbüros Rogge & Co. Hydrogeologie. Den Freunden und Kollegen Thomas Reimann, Jens Fahl, Matthias Pätsch, Markus Einecke, Christian Karpf und Dirk Marre danke ich für Ihren fachlichen Rat und Ihr Interesse an dieser Arbeit. Basis der Arbeit bilden hunderte Messwerte. Herzlich danken möchte ich Frau Doreen Degenhardt für die sehr engagierte und zuverlässige Laborarbeit. Letztlich ist noch einer ganzen Reihe von Mitmenschen zu danken: Meiner Familie und Freunden für die Ermunterung, diese Arbeit zu schreiben; Herrn Professor Rudolph Liedl und Herrn Professor Peter Krebs für den Freiraum, die Schriftfassung der Arbeit anzufertigen, Katrin für die Software, den Mitarbeitern vom Department für Nutzpflanzwissenschaften, Abt. Agrarpedologie der Universität Göttingen und des Kompetenzzentrums Stabile Isotope, Forschungszentrum Waldökosysteme der Universität Göttingen, für zahllose Gas- und Isotopenmessungen, Professor Zachmann von der Technischen Universität Braunschweig, Dr. Hilmar Börnick und Dr. Heike Brückner für zahlreiche Schwefel- und Kohlenstoffanalysen, sowie den Mitarbeitern vom Institut für Grundwasserwirtschaft.

Inhaltsverzeichnis

Thesen

(1) Anhand des Gehaltes an Sulfid und organischem Kohlenstoff in Sedimentproben ist eine chemo-lithotrophe und chemo-organotrophe Denitrifikation möglich.

(2) Der Gehalt an Reduktionsmitteln wird anhand von Proben aus der Spülbohrung gegenüber Kernproben unterschätzt.

(3) Enge Korrelationen wurden für den Glühverlust und den Gehalt organischen Kohlenstoffs mit größer r_s = 0,78 und zwischen Sulfid- und Gesamtschwefel mit größer r_s = 0,99 für Sediment aus dem Aquifer Wehnsen gefunden.

(4) Die chemo-lithotrophe Denitrifikation ist der dominierende Eliminationsprozess des Nitrates in den drei betrachteten Grundwasserleitern Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde.

(5) An einigen Sedimentproben wurde Nitratsorption nachgewiesen. Diese betrug maximal 0,85 $mg \cdot kg^{-1}$ N.

(6) Innerhalb einer Versuchsdauer von 570 d werden im Batchversuch zwischen 5% und 50% des Sulfid-Vorrates oxidiert.

(7) Die N_2-Überschussgehalte, berechnet anhand von Daten der N_2/Ar-Messung, liegen deutlich über denen der N_2O-Konzentrationen.

(8) Einbohrlochtracer-Versuche liefern vergleichbare Ergebnisse bezüglich der Denitrifikation wie Laborversuche, die mit Sediment gleicher Teufe durchgeführt wurden.

(9) Anhand der Einbohrloch-Tracerversuchen kann auf den Gehalt an Reduktionsmitteln im Sediment geschlossen werden.

(10) Die N_2/Ar-Messungen und Laboruntersuchungen liefern hinsichtlich der Denitrifikation unterschiedliche Ergebnisse.

Thesis

(1) The contents of sulphides and organic carbon of sediment samples allows both chemo-lithotrophic and chemo-organotrophic denitrification.

(2) The contents of reductive matter were underestimated for sediment samples of sludge drilling compared with core-drilling.

(3) Strong correlations were found for loss of ignition and organic carbon $r_s = 0.78$ and between sulphide-sulphur and total-sulphur with $r_s = 0.99$ for sediment from Wehnsen aquifer.

(4) Chemo-lithotrophic denitrification is the main process of nitrate elimination in the aquifers of Sulingen, Wehnsen and Thülsfelde.

(5) Sorption of nitrate was detected in some sediment samples. The maximum was 0.85 mg N per kg sediment.

(6) Between 5 % and 50 % of the sulphide were oxidized in batchtests in 570 days.

(7) The content of excess-N_2, calculated from data of N_2/Ar measurements is higher than the measured concentration of N_2O.

(8) Results from push&pull-tests and batchtests are similar.

(9) The content of reductive matter can be estimated from data of push&pull-tests.

(10) The results from measurements of gases (N_2/Ar) and laboratory studies concerning the denitrification are not comparable.

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit werden Ergebnisse von Untersuchungen zur Denitrifikation in Grundwasserleitern vorgestellt. Dabei werden drei pleistozäne norddeutsche Grundwasserleiter betrachtet. Grundlage der Untersuchungen im Labor bilden Sedimentproben, die aus Bohrungen mit einer maximalen Teufe von 60 m u GOK, gewonnen wurden. Der Gehalt an organischem Kohlenstoff und Sulfidschwefel erlaubt den Ablauf einer chemo-organotrophen und chemo-lithotrophen Denitrifikation. Die Laborversuche zeigen eine maximale Nitratelimination von 0,2 $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ N, hauptsächlich infolge chemo-lithotropher Denitrification. Für einige Sedimentproben wurde eine Sorption von Nitrat mit maximal 0,85 $mg \cdot kg^{-1}$N nachgewiesen. Im Feld wurde der Ablauf einer Denitrifikation anhand von N_2- und Ar-Messungen nachgewiesen. Die Größenordnung der Denitrifikation im Aquifer wurde außerdem mit Einbohrloch-Tracerversuchen (Push&Pull-Tests) bestimmt. Diese Tracerversuche wurden in Teufen durchgeführt, aus denen Sedimentproben für Laboruntersuchungen gewonnen worden waren. Die Labor- und Tracerversuche lieferten vergleichbare Ergebnisse. Weiterhin wird ein Weg gezeigt, wie Punktinformationen zum N-Umsatz mittels stochastischer Simulation in die Fläche übertragen werden und somit in numerische Transportmodelle eingebunden werden können.

Abstract

This thesis shows results from investigations about denitrification, a possibility is shown in aquifers. The investigation areas are three pleistocene aquifers in northern Germany. The studies in laboratory are based on samples of drillings until a depth of 60 m. The content of organic carbon and sulphides allows both chemo-organotrophic and chem-lithotrophic denitrification. The maximum of nitrate, that was eliminated, mainly by chemo-lithotrophic denitrification, was 0.2 mg N per kg sediment and day. In some samples a sorption of nitrate was detected at a maximum of 0.85 mg N per kg sediment. Denitrification in situ was detected by measurements of the gases N_2 and Ar at some measurement wells. Denitrification in situ was also quantified by push&pull-tests (single-well-tracer tests). Push&pull-tests as well as laboratory studies were carried out with sediment samples of respective measurement-wells. Similar results were found for push&pull tests and batchtests. Further, a possibility is shown how point-data concerning nitrate-metabolism can be transferred into two dimensions by stochastic simulation. Thus one can implement point-data into numerical transport-models.

Formelzeichen und Abkürzungen

α		Irrtumswahrscheinlichkeit (z.B. bei Signifikanztests)
α_i		Bunsenscher Absorptionskoeffizient
α_x, α_z	[m]	Dispersivität (in x- und z-Richtung)
a	[m]	Reichweite (range), Kenngröße des Variogramms
a_k		Basiswert, siehe Sensitivitätsanalyse, Kapitel 8
AAS		Atomabsorptionsspektrometer
$\beta(t_i)$	[$mg \cdot l^{-1}$]	Konzentration zum Zeitpunkt t_i
β_{in}	[$mg \cdot l^{-1}$]	Eintrags-Konzentration
C_{HWL}	[%], [$mg \cdot kg^{-1}$]	Gehalt an heißwasserlöslichem Kohlenstoff
C_l	[%], [$mg \cdot kg^{-1}$]	Gehalt des labilen Kohlenstoffs nach der $KMnO_4$-Methode, siehe Anlage 2, Blatt 2-1
D(t)	[$mg \cdot kg^{-1}$]	Summe der gebildeten Denitrifikations-Produkte NO_2^-, N_2O und N_2
DOC	[%], [$mg \cdot kg^{-1}$]	Gehalt an gelösten organischen Kohlenstoff
DOC_l	[%], [$mg \cdot kg^{-1}$]	Gehalt an löslichem organischem Kohlenstoff
E{}		Erwartungsfunktion, siehe Kapitel 8
E(t)	[$mg \cdot kg^{-1}$]	zeitabhängige Elimination von Nitrat
Eh	[mV]	Redoxspannung, ~potential
EZG		Einzugsgebiet
FEL	[Ωm]	elektrische Widerstandsmessung mit fokussierter Elektrodenanordnung (Bohrlochgeophysik)
γ		Variogramm
ΔG_r^0		Freie Standardenthalpie in [$kJ \cdot mol^{-1}$] NO_3^-
Gamma-Ray, GR, γ-Ray-LOG	[API]	Messung der Gamma-Strahlung (Bohrlochgeophysik)
GOK, uGOK		Geländeoberkante bzw. unter Geländeoberkante
G(t)		Gasproduktion, berechnet als Summe der Gase $N_{2(Deni)}$ und N_2O
GWL		Grundwasserleiter
GWN	[mm]	Grundwasserneubildung
h		Schrittweite im Variogramm
HGWL		Hauptgrundwasserleiter (unterer Grundwasserleiter)
i		Indikatorvariable
k		Bezeichnung einer Klasse, siehe Kapitel 8
K, K-Wert	[m/s]	hydraulische Leitfähigkeit
ℓ_α		Kriging-Schätzgewicht
λ		Oberbegriff für einen Umsatzkennwert nach einer Reaktion 0. oder 1. Ordnung
λ_o	[$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$]	Umsatzkennwert nach einer Reaktion 0. Ordnung
λ_1	[a^{-1}]	Umsatzkennwert nach einer Reaktion 1. Ordnung

λ_1'	[a^{-1}]	für die Sensitivitätsanalyse reduzierter Umsatzkennwert nach einer Reaktion 1. Ordnung, siehe Kapitel 8
MAE		mittlerer absoluter Fehler (Mean Absolute Error)
MMK		Michaelis-Menten-Kinetik
Mst		Messstelle
MW		arithmetische Mittel
n		Anzahl von Messwerten (bei statistischen Betrachtungen)
$N_{2\text{-exc}}$		Überschuss-N_2, bestimmt aus dem N_2/Ar-Verhältnis, Kapitel 5
$N_{2(Deni)}$		durch Denitrifikation gebildeter molekularer Stickstoff
N_2O		Lachgas
NO_2^-		Nitrit
n_{ges}	[-]	Gesamtporosität (des Aquifers, einer Probe)
n.n.		nicht nachweisbar
n.b.		nicht bestimmt, bzw. nicht analysiert
n_e	[-]	nutzbare bzw. effektive Porosität
NRMS		normierte Wurzel des mittleren Fehlerquadrates (Normalized Root Mean Squared Error)
oGWL		oberer Grundwasserleiter
P		Niederschlag
p*(k)		relative Häufigkeit des Auftretens der Klasse k, siehe Kapitel 8
r_p		Korrelationskoeffizient nach Pearson
r_s		Korrelationskoeffizient nach Spearmann
R^2		Bestimmtheitsmaß (Pearson)
RMS		Wurzel des mittleren Fehlerquadrates (Root Mean Squared Error)
σ^2		Streuung
S_{gesamt}, S_{ges}	[%], [$mg \cdot kg^{-1}$]	Gehalt an Gesamtschwefel
S-Sulfid	[%], [$mg \cdot kg^{-1}$]	Gehalt an Sulfidschwefel
S_k		Sensitivitätskoeffizient
S_s	[m^{-1}]	spezifischer Speicherkoeffizient
S(t)		Sulfatproduktion
S_y		spezifischer Ertrag
s		Standardabweichung
t_a	[a]	Grundwasseralter
TOC	[%], [$mg \cdot kg^{-1}$]	gesamter organischer Kohlenstoff
TVO		Trinkwasserverordnung
uGWL		unterer Grundwasserleiter
WV		Wasserverband
WW		Wasserwerk
X(t)		zeitabhängige Reduktion der Nitrat-Konzentration durch weitere Prozesse ohne Bildung von NO_2^-, N_2O und N_2 (z.B. Sorption)
y_i		modellabhängige Variable, siehe „Sensitivitätsanalyse“, Kapitel 8
Z(x,t)		zeit- und ortsabhängige Zufallsvariable

Häufig verwendete Formeln

Durchschnittlicher absoluter Fehler

Der Durchschnittliche absolute Fehler wird als *Mean Absolute Error* bezeichnet und mit ***MAE*** abgekürzt.

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|X_{i,berechnet} - X_{i,gemessen}\right|$$

Standardabweichung

Die Standardabweichung wird **s** abgekürzt:

$$s = \pm\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(X_{i,berechnet} - X_{i,gemessen}\right)^2 - \left(\sum_{i=1}^{n}\left(X_{i,berechnet} - X_{i,gemessen}\right)\right)^2}{n-1}}$$

Mittlere quadratische Abweichung

Die mittlere quadratische Abweichung wird auch als *Root Mean Squared Error* bezeichnet und mit ***RMS*** abgekürzt.

$$RMS = \frac{1}{n}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(X_{i,berechnet} - X_{i,gemessen})^2}$$

Normalisierte mittlere quadratische Abweichung

Die normalisierte mittlere quadratische Abweichung wird auch als *Normalized Root Mean Squared Error* bezeichnet und mit ***NRMS*** abgekürzt.

$$NRMS = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(X_{i,berechnet} - X_{i,gemessen})^2}}{n\cdot\left(X_{gemessen}\right)_{\max} - \left(X_{berechnet}\right)_{\min}}$$

1 Einleitung

1.1 Hintergrund

Einzugsgebiete vieler Grundwasserleiter, aus denen Trinkwasser gewonnen wird, werden landwirtschaftlich genutzt. Eine Folge dieser Landnutzung ist unter anderem das Ausbringen von Düngemitteln in Form von Stickstoffverbindungen, die sich im Grundwasser teilweise in erhöhten Nitratkonzentrationen widerspiegeln. Weltweit gibt es Grenzwerte für die Nitratkonzentration im Trinkwasser. Zwar ist eine Elimination des Nitrates aus dem Rohwasser im Zuge der Trinkwasseraufbereitung möglich, doch mit erheblichen Kosten verbunden. Durch verschiedene Umsatzprozesse, von denen die Denitrifikation in den meisten norddeutschen Grundwasserleitern dominiert, wird die Konzentration des Nitrates verringert, so dass eine Wassergewinnung ohne anschließende Nitratelimination noch möglich ist. Für den Ablauf dieser Umsatzprozesse sind unter Anderem verschiedene Reaktionspartner notwendig, zum Beispiel organischer Kohlenstoff oder Sulfidverbindungen. Diese sind im Untergrund meist heterogen verteilt, werden durch Umsatzprozesse verbraucht und stehen somit nur begrenzt zur Verfügung.

Der Wasserversorger, der mit einer zukunftsorientierten Planung der Wasserfassungen betraut wird, sollte wissen, zu welchem Zeitpunkt welche Nitratkonzentration im Förderbrunnen ankommen wird und welche Möglichkeiten der Steuerung, beispielsweise in Form von Änderungen der Landnutzung oder der Wasserentnahme, möglich und nutzbringend sind. Um Antworten auf diese Fragen zu finden, ist zu klären, welche Prozesse in welchem Umfang die Konzentration in welchen Zonen des Aquifers mindern und wie lange bei gegebener Nitratzufuhr diese Prozesse stattfinden.

Eine Voraussetzung für die wasserwirtschaftliche Planung ist deshalb die Beschreibung der Konzentrationsentwicklung von Nitrat im Grundwasserleiter. Diese wird von Einflussfaktoren, die mit dem Eintrag aus dem durchwurzelten Bodenbereich, über Transport und Umsatz im wasserungesättigten Bereich bis hin zur hydrodynamischen Dispersion und zum Umsatz im Aquifer und schließlich zum Austrag durch Wasserentnahmen reichen können, bestimmt.

Diese Arbeit konzentriert sich auf die Identifizierung und Quantifizierung des Nitratumsatzes im Grundwasserleiter. Dazu wurden Untersuchungen im Labor und Feld für drei Grundwasserleiter der norddeutschen Tiefebene durchgeführt und im Rahmen dieser Arbeit ausgewertet. Es handelt sich dabei um die Gebiete Thülsfelde, Sulingen und Wehnsen.

1.2 Zielstellung und zu lösende Aufgaben

(1) Identifizierung der Prozesse des Nitratumsatzes im Grundwasserleiter:

Zu Beginn, in Kapitel 2, werden mögliche Prozesse der Minderung von Nitrat im Grundwasser beschrieben. Nach dem Stand des Wissens ist die Denitrifikation in norddeutschen Grundwasserleitern der quantitativ bedeutendste Prozess, siehe beispielsweise WALTHER (1999), KÖLLE (2001), HOUBEN (2000). Dies galt als Arbeitshypothese, so dass die durchgeführten Untersuchungen vorrangig zur Identifizierung der Art der Denitrifikation, chemo-organotroph oder chemo-lithotroph, ausgelegt waren. Parallel dazu wurde der Ablauf anderer Prozesse geprüft. Diese Prozesse sind die Dissimilatorische Nitratreduktion zu Ammonium (DNRA) und die Nitratsorption. Der Ablauf und die Art der Denitrifikation wurde im Labor und Feld anhand ausgewählter Parameter der Wasserbeschaffenheit

und anhand von Messungen der gelösten Gase N_2 und N_2O, siehe Kapitel 4 und 5, bestimmt.

(2) Quantifizieren der Umsatzleistung und des Depots an Reaktionspartnern der Denitrifikation:

Die mathematische Beschreibung der Kinetik von Umsatzprozessen ermöglicht das Ableiten von Kennwerten (λ). Diese Kennwerte stellen beispielsweise Eingangsparameter für numerische Transportmodelle dar, mit denen die Ausbreitung des Nitrates im Grundwasserleiter beschrieben werden kann. Der Ablauf der Denitrifikation ist an das Vorhandensein von Reaktionspartnern geknüpft. Um abzuschätzen, in welchem Umfang und wie lang Umsatzprozesse die Konzentration des Nitrates im Aquifer mindern können, muss deshalb auch das Depot an Reaktionspartnern im Grundwasserleiter, dessen hydraulische Verfügbarkeit und räumliche Verteilung abgeschätzt werden.

Hauptsächlich organischer Kohlenstoff und Sulfid-Schwefel stellen nach bisherigem Kenntnisstand, siehe Kapitel 2, Reduktionsmittel der Denitrifikation dar. Der Gehalt dieser Reduktionsmittel wurde an Sedimentproben bestimmt, die aus Spül- und Kernbohrungen gewonnen worden sind, siehe Kapitel 4.1.

Die Bestimmung der Umsatzkinetik erfolgte im Labor über Batch- oder Säulenversuche, siehe Kapitel 4.2 und 4.3. Dazu wurden Sedimentproben aus Kernbohrungen verwendet. Beispielsweise mit Batchversuchen kann die biologische Verfügbarkeit der Reduktionsmittel bestimmt werden. Voraussetzung dafür ist, dass die Prozesse, hier der Nitratabbau, zum Stillstand gekommen sind. Nach 1 ½ Jahren war dies bei wenigen Versuchen der Fall, so dass meist nur eine biologische Mindest-Verfügbarkeit bestimmt werden konnte.

Um die mögliche Umsatzleistung der Denitrifikation im Feld zu bestimmen, wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Einbohrloch-Tracertechnik weiterentwickelt und angewendet, siehe Kapitel 5.2. Die Arbeitshypothese dabei war, dass Labor- und Tracerversuche, durchgeführt an gleichem Sediment, vergleichbare Ergebnisse liefern. Für 5 Standorte lag Sediment und somit das Resultat von Batchversuchen für die Filterteufe von Messstellen vor, an denen Tracerversuche durchgeführt worden sind. Ein Vergleich von Feld- und Laborversuchen war somit möglich.

(3) Vergleich des N-Umsatzes in den drei untersuchten Aquifern

Die untersuchten Grundwasserleiter von Sulingen, Thülsfelde und Wehnsen werden in Kapitel 3 beschrieben. In diesen drei Gebieten wurden die gleichen Untersuchungsmethoden zum N-Umsatz angewendet. Somit konnte geprüft werden, ob die Ergebnisse aus Feld- und Laboruntersuchungen tendenziell übereinstimmen und ob eine Charakterisierung der Grundwasserleiter hinsichtlich des N-Umsatzes möglich ist. Die Resultate dieser Auswertung sind in Kapitel 6 dargestellt.

(4) Ableiten von Empfehlungen für Untersuchungen zur Denitrifikation:

Für Untersuchungen, mit denen der Nitrattransport und –umsatz im Grundwasserleiter beschrieben werden soll, wurde eine Empfehlung, siehe Kapitel 7, entworfen. Basis dafür bildeten der Kenntnisgewinn aus den Untersuchungen im Feld- und Labor.

(5) Regionalisierung und Prüfung der Sensitivität eines räumlich variablen N-Umsatzes:

Sowohl die Untersuchungen am Bohrgut im Labor, als auch die Tracerversuche im Feld liefern Punktinformationen. Beispielsweise für die Anwendung numerischer Transportmodelle sind jedoch räumlich hoch aufgelöste Datensätze zu erzeugen. Geostatistische Verfahren, wie zum Beispiel das Kriging, wurden an Daten des Gebietes Thülsfelde getestet, PÄTSCH (2006). Die Anwendung des Kriging lieferte aber keine zufrieden stellenden Ergebnisse. Für einen 2D-Ausschnitt des Aquifers in Wehnsen, wurde mit einem stochastischen Simulationsverfahren die räumliche Verteilung der Umsatzkennwerte realisiert, siehe Kapitel 8. Damit wurde ein Weg aufgezeigt, wie Punktinformationen zum Nitratumsatz in ein numerisches Transportmodell eingebunden werden können. Ein weiteres Ziel war es, die Sensitivität ausgewählter Parameter und deren räumlicher Verteilung zu bestimmen. Die Sensitivitätsanalyse erfolgt an einem vertikal-ebenen 2D-Transsekt, welches in Anlehnung an einen Aquiferabschnitt des Gebietes Wehnsen aufgebaut wurde. Die Wirkungsweise der Randbedingung (Stoffeintrag), hydraulische Kennwerte, Dispersion und Umsatzkennwerte, sowie deren räumliche Verteilung wurden daran getestet.

1.3 Untersuchungsprogramm

In den folgenden Kapiteln werden zu Beginn jeweils die Ziele und das Untersuchungsprogramm für die einzelnen Arbeitsschritte nochmals präzisiert aufgeführt. An dieser Stelle, wie auch im vorangegangenen Abschnitt, wird deshalb lediglich ein Überblick dargestellt.

Für die Untersuchungen im Labor, zur Bestimmung des Gehaltes an Reduktionsmitteln und von Kennwerten des N-Umsatzes, sind Sedimentproben aus dem Aquifer notwendig. Im Gebiet Sulingen wurden an zwei, in Wehnsen an drei Standorten Bohrungen niedergebracht, siehe Tabelle 1-1.

Tabelle 1-1: Anzahl im Labor untersuchter Proben

Gebiet	Sulingen	Wehnsen	
Bohrung	**Kernbohrung**	**Spülbohrung**	**Kernbohrung**
Hydraulische Parameter[1)]	60	157	28
Reduktionsmittel[2)]	29	174	58
Batchversuche	4	-	23
Säulenversuche	-	-	3

[1)]umfasst Feinkornanteil und hydraulische Leitfähigkeit K
[2)]umfasst S-Spezies, organisch C und den Glühverlust

Zur Abschätzung des reaktiven Stoffdepots wurden im Gebiet Sulingen bei den Bohrungen Kernproben entnommen, siehe Anlage 1, Blatt 1-7 und 1-8. Im Gebiet Wehnsen wurden in einem ersten Schritt drei Spülbohrungen abgeteuft, siehe Anlage 1, Blatt 1-1 bis 1-3. Pro Meter Bohrteufe wurde eine gestörte Sedimentprobe gewonnen. An diesen Proben wurden die TOC- und teilweise auch Schwefelgehalte, sowie der Indikatorparameter Glühverlust und hydraulische Kennwerte bestimmt, um hydraulisch aktive Areale auszuweisen, in denen das Stoffdepot eine Denitrifikation erlaubt. Aus diesen Bereichen wurden in einem zweiten Schritt ungestörte Proben für die Laborversuche zum N-Umsatz gewonnen. Dazu wurden an den gleichen Standorten nochmals Bohrungen abgeteuft und Bohrkerne entnommen, siehe Anla-

ge 1, Blatt 1-4 bis 1-6. An den Kernproben wurden teilweise die gleichen Parameter bestimmt, so dass ein Vergleich von Ergebnissen aus Spül- und Kernproben durchgeführt werden konnte, siehe Kapitel 4. Zur Interpretation des geologischen Schichtenaufbaus wurden geophysikalische Messungen durchgeführt, siehe Tabelle 1-2.

Für ausgewählte Teufenbereiche wurden Batchversuche durchgeführt, mit deren Ergebnissen die Kinetik des Umsatzes beschrieben werden kann. Die Dauer der Batchversuche betrug etwa 19 Monate. Allerdings ist die Nitratelimination in den wenigsten Versuchen zum Stillstand gekommen, so dass eine Abschätzung der Lebensdauer der Umsatzprozesse bzw. die biologische Verfügbarkeit der Reduktionsmittel nur in Ansätzen erfolgen konnte.

Die Auswertung von Parametern der Wassergüte an Vorfeldmessstellen aller drei Gebiete sollte Indizien für den Ablauf von Umsatzprozessen liefern. An ausgewählten Messstellen wurden das N_2/Ar-Verhältnis und die N_2O-Konzentration zum Nachweis der Denitrifikation im Einzugsgebiet der Filterstrecke einer Messstelle gemessen, siehe Tabelle 1-2. Um Punktinformationen zum Nitratumsatz im Nahbereich einer Messstelle zu erhalten, wurde die bereits für oberflächennahes Grundwasser eingesetzte Einbohrloch-Tracer-Methode für Messstellen im tieferen Grundwasserleiter weiterentwickelt und erstmals angewendet.

Tabelle 1-2: Daten der Felduntersuchungen

Gebiet	Sulingen	Wehnsen	Thülsfelde
An neu geteuften Bohrungen			
Geophysik[3]	2	3	
Wasserbeschaffenheit[1]	2	4	-
Tracerversuche[2]	2	3	-
N_2/Ar-Messung[2]	3	4	-
N_2O-Messung[2]	3	4	-
An bestehenden Vorfeldmessstellen			
Wasserbeschaffenheit	-	21	90[1]
Tracerversuche[2]	-	3	3
N_2/Ar-Messung[2]	-	15	30
N_2O-Messung[2]	-	15	30

[1] Daten vom Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverband bereitgestellt
[2] Analysen ganz oder teilweise durch das Department für Nutzpflanzwissenschaften, Abt. Agrarpedologie und das Kompetenzzentrum Stabile Isotope, Forschungszentrum Waldökosysteme der Universität Göttingen durchgeführt
[3] umfasst FEL und Gamma-Ray, Daten vom Ingenieurbüro Rogge&Co. Hydrogeologie im Auftrag der Wasserverbände, angegeben ist die Zahl der untersuchten Standorte

Zum Aufbau der Arbeit sei Folgendes gesagt: Im Kapitel 2 wird der Kenntnisstand über mögliche Umsatzprozesse von Nitrat im Grundwasserleiter dargestellt. Im Kapitel 3 wird ein kurzer Überblick über die hydrogeologischen Verhältnisse in den drei Untersuchungsgebieten gegeben. In den Kapiteln 4 und 5 werden eingangs die Ziele der Labor- und Felduntersuchungen präzisiert. Daran schließt sich eine Darstellung der angewendeten Methoden und der Ergebnisse an. Im Schlussteil des jeweiligen Kapitels werden die Ergebnisse diskutiert und bewertet.

2 Prozesse des Nitratumsatzes - Kenntnisstand

2.1 Übersicht

Unter Nitratumsatzprozessen werden hier Prozesse zusammengefasst, die die Konzentration des gelösten Nitrates im Grundwasser vermindern können. Ausgenommen hiervon sind Reaktionen von Nitrat mit diversen organischen Kontaminanden (beispielsweise BTEX), da diese in den drei betrachteten Untersuchungsgebieten nicht anzutreffen sind. Tabelle 2-1 und Tabelle 2-2 enthalten mögliche N-Umsatzprozesse im Grundwasserleiter als Übersichtsdarstellung. In den anschließenden Abschnitten werden die Prozesse im Einzelnen erläutert.

Tabelle 2-1: Mögliche mikro-biologische Nitrat-Umsatzprozesse

Bezeichnung	Kennzeichen	
Nitratassimilation (2 – 1)[1)]	Minderung:	NO_3^- , CO_2
	Anstieg:	$N_{organisch}$, $C_2H_5O_2N$, pH-Wert
	Weitere Merkmale:	aerob und anaerob, Unterbindung durch NH_4^+
DNRA (Dissimilatorische Nitratreduktion zu Ammonium) oder Nitratammonifikation (2 – 2)[1)]	Minderung:	NO_3^- , $C_{org.}$
	Anstieg:	(NO_2^-, NH_2OH), NH_4^+, HCO_3^-
	Weitere Merkmale:	geringer Energiegewinn, streng anaerobes Milieu
anaerobe Ammoniumoxidation (Anammox®) (2 - 3) bis (2 - 5)[1)]	Minderung:	NH_4^+, NO_3, NO_2^-, pH-Wert
	Anstieg:	N_2
	Weitere Merkmale:	evtl. Unterbindung durch NO_2^-
chemo-organotrophe Denitrifikation (heterotrophe ~)	Minderung:	NO_3^- , $C_{org.}$ (gelöst oder partikulär)
	Anstieg:	N_2, N_2O, CO_2, (ab pH > 4,2: CO_2 => HCO_3^-)
	Weitere Merkmale:	Ablauf in Teilschritten
chemo-lithotrophe Denitrifikation (autrotrophe~)	Minderung:	NO_3^- , Fe^{2+} (nur Teilschritt I)
	Anstieg:	N_2, N_2O, Fe^{2+} (Teilschritt II) , SO_4^{2-},
	Weitere Merkmale:	Ablauf in Teilschritten
bakterielle Fe^{2+} - Oxidation mit Nitrat (2 - 13)[1)]	Minderung:	NO_3^- , Fe^{2+}, $FeCO_3$
	Anstieg:	$Fe(OH)_3$, teilweise auch HCO_3^-
	Weitere Merkmale:	

[1)] Die in Klammer gesetzte Ziffer gibt die Nummer der stöchiometrischen Formel im Text an

Tabelle 2-2: Mögliche geochemische Nitrat-Umsatzprozesse

Bezeichnung	Kennzeichen	
Adsorption	Minderung:	NO_3^-, z.T. Kationen wie Ca^{2+}, Mg^{2+}
	Weitere Merkmale:	kein Anstieg von: N_2, N_2O, NO_2^- od. NH_4^+
Chemisch katalysierte Oxidation von Fe^{2+}	Minderung:	NO_3^- , Fe^{2+}
	Anstieg:	FeOOH, Fe_3O_4, $Fe_6(OH)_x$ NH_4^+, NO_2^-, N_2
	Weitere Merkmale:	Katalysatoren (wie Cu^{2+}, Sn^{2+} oder Ag^{2+} oder Goethit (α-FeOOH) und Lepidokrit (γ-FeOOH) notwendig
Green Rust = Reaktion mit Fe(II,III)-Hydroxiden (2 – 14)[1)]	Minderung:	NO_3^- , pH-Wert
	Anstieg:	Fe_3O_4, NH_4^+, SO_4^{2-}
	Weitere Merkmale:	Metallionen katalysieren die Reaktion

[1)] Die in Klammer gesetzte Ziffer gibt die Nummer der stöchiometrischen Formel im Text an

Es sei an dieser Stelle nochmals darauf hingewiesen, dass der mikrobiologisch gesteuerte Nitratumsatz, speziell die Denitrifikation für die hier vorgestellten Grundwasserleiter Norddeutschlands quantitativ am bedeutendsten ist, WALTHER (1999), KÖLLE (2001), HOUBEN (2000). Deshalb wurde das Untersuchungsprogramm auf die Beschreibung dieses Prozesses ausgerichtet.

2.2 Biologische Umsatzprozesse

2.2.1 Nitratassimilation

Nach ROHMANN & SONTHEIMER (1985) läuft die Nitratassimilation nach folgender Stöchiometrie ab, wobei verschiedene Zwischenstufen durchlaufen werden, bei denen Nitrit und vermutlich auch Hydroxylamin entsteht:

$$2NO_3^- + 4H_2O + 4CO_2 + 2H^+ \rightarrow 7O_2 + 2C_2H_5O_2N \qquad (2-1)$$

bzw. die allgemeine Form nach SCHLEGEL (1992):

$$8[H] + H^+ + NO_3^- \rightarrow NH_4^+ + OH^- + H_2O, \qquad (2-1a)$$

Untersuchungen von MCCARTY et al. (1993) zeigten, dass Mn^{2+} die NH_4^+ - Assimilation unterbindet.

2.2.2 DNRA (Dissimilatorische Nitratreduktion zu Ammonium)

Die dissimilatorische Nitratreduktion zu Ammonium, auch als Nitrat-Ammonifikation oder Nitrat-Ammonifizierung bezeichnet, läuft unter anaeroben Verhältnissen mit Kohlenhydraten über die Bildung der Zwischenprodukte Nitrit und Hydroxylamin ab, ROHMANN & SONTHEIMER (1985):

$$2C_n(H_2O)_n + nNO_3^- \rightarrow 2\,nHCO_3^- + nH_2O + nNH_4^+ \qquad (2-2)$$

Beteiligte Bakterien sind *Aeromonas, Vibrio, Klebsielle, Achromobacter fischeri, Citrobacter freundii, Escherichia coli*, COLE & BROWN (1980), z.T. erfolgt eine Reduktion nur bis zum Nitrit. Bei der Denitrifikation entsteht molekularer Stickstoff, der entgasen und somit das System Aquifer verlassen kann. Beim Ablauf der DNRA hingegen bleibt der Stickstoff in Form von gelöstem NH_4^+ im Aquifer erhalten. Im Falle eines Wechsels von reduzierenden zu oxidierenden Milieubedingungen kann NH_4^+ durch Nitrifikation in Nitrat umgesetzt werden, KOROM (1992).

Aufgrund des geringen Energiegewinns und des notwenigen niedrigen Redoxpotenials gehen ROHMANN & SONTHEIMER (1985) davon aus, dass DNRA erst in Aquiferbereichen stattfindet, in denen keine Denitrifikation mehr möglich ist. Eine Ausnahme bilden beispielsweise Torfschichten, in denen bei entsprechend niedrigem Redoxpotential DNRA quantitativ bedeutsam am Nitratumsatz beteiligt sein kann, SOMMER (2000). Untersuchungen von BINNERUP et al. (1992) an Sedimenten eines Fjords zeigen eine unbedeutende DNRA, verglichen mit der Denitrifikation. Einige jüngere Studien, BONIN et al. (1998), (2005), AN et al. (2002) an marinen Sedimenten von Meeresarmen und Salzmarschen haben allerdings gezeigt, dass durch DNRA vergleichbare Nitratmengen umgesetzt werden können, wie über Denitrifikation. Auch für untersuchte Flusssedimente nimmt die DNRA unter anaeroben Bedingungen und bei hohen Konzentrationen organischen Kohlenstoffs einen beachtlichen Teil der Nitratreduktion ein, KELSO et al. (1997).

2.2.3 Anaerobe Ammoniumoxidation

Erste Laborgebnisse zur anaeroben Ammoniumoxidation veröffentlichten MULDER et al. (1994), wobei der biologische Prozess unter der Bezeichnung ‚Anammox' patentiert worden ist. Im Fluidbett-Reaktor wurde eine NH_4^+ - Eliminationsrate von 0,4 kg $(NH_4^+\text{-}N)\cdot m^{-3}\cdot d^{-1}$ festgestellt. Durchgeführte Batchversuche zeigten, dass der NH_4^+ - Umsatz abhängig von der Nitratmenge war. Demnach und nach der im Folgenden angegebenen Reaktionsgleichung (2–3) werden beim Prozess ‚Anammox' 0,24 kg $(NO_3^- - N)\cdot m^{-3}\cdot d^{-1}$ umgesetzt.

VAN DE GRAAF et al. (1995) geben folgende hypothetische Reaktionstypen für Ammonium mit Stickoxiden an:

$$5NH_4^+ + 3NO_3^- \rightarrow 4N_2 + 9H_2O + 2H^+ \qquad (2-3)$$

$$5NH_4^+ + 5H_2O \rightarrow 5NH_2OH + 10[H] + 5H^+ \qquad (2-4a)$$

$$5NH_2OH + NO_3^- \rightarrow 3N_2 + 8H_2O \qquad (2-4b)$$

$$NH_4^+ + NO_2^- \rightarrow N_2 + 2H_2O \qquad (2-5)$$

Wobei deren eigene Untersuchungen mit markiertem Ammonium ($^{15}NH_4^+$) nach Reaktionstyp (2–5) abliefen und somit NO_2^- anstelle von NO_3^- als Elektronenakzeptor identifiziert wurde. STROUS et al. (1999) stellten unter Laborbedingungen fest, dass bei einer NO_2^- - Konzentration von 0,1 $g\cdot L^{-1}$ N der ‚Anammox' – Prozess komplett unterbunden wird.

TRIMMER et al. (2003) stellten für Flusssedimente Südostenglands fest, dass zwischen 1.8 % des durch Umsatzprozesse entstehenden N_2 auf anaerobe Ammoniumoxidation zurückzuführen sind. Die Bedeutung des ‚Anammox' – Prozesses für Grundwasserleiter, insbesondere in Kombination mit anderen Prozessen, wie zum Beispiel der dissimilatorischen Nitratreduktion zu Ammonium ist noch nicht ausreichend bekannt.

2.2.4 Denitrifikation

Chemo-organotrophe Denitrifikation

Die allgemeine stöchiometrische Formel der chemo-organo- oder heterotrophen Denitrifikation lautet, KÖLLE (1999):

$$5C_{org.} + 4NO_3^- + 4H^+ \rightarrow 2N_2 + 5CO_2 + 2H_2O \qquad (2-6)$$

Entsprechend dieser Stöchiometrie werden von 1mg (NO_3^-) etwa 0,2421 mg C_{org} oxidiert. Im sauren Milieu kommt es durch den Protonen-Verbrauch zu einem Anstieg des pH-Wertes. Für einen pH-Wert von 7 gilt, nach APELLO & POSTMA (1996):

$$5C_{org.} + 4NO_3^- + 2H_2O \rightarrow 2N_2 + 4HCO_3^- + CO_2 \qquad (2-7)$$

$$\Delta G_r^0 = -458{,}06\ kJ \cdot mol^{-1} NO_3^-$$

$C_{org.}$ steht dabei für eine beliebige organische Kohlenstoffverbindung, die als Substrat verwertbar ist. Durch den Protonenverbrauch kommt es unter saueren Milieubedingungen im Grundwasser zu einem Anstieg des pH-Wertes. Das entstehende CO_2 löst sich im Wasser bis zur Sättigungskonzentration, darüber hinaus gast es aus. Der pH-Wertbereich der untersuchten Grundwasserleiter liegt etwa zwischen 4.5 und 7.5, siehe Kapitel 6. In diesem Bereich liegt das CO_2 etwa zwischen 5% und 90% in dissoziierter Form als HCO_3^- vor, so dass sich der Ablauf einer chemo-organotrophen Denitrifikation in einem Anstieg der Härte bemerkbar macht. Unter basischen Bedingungen führt die chemo-organotrophe Denitrifikation zu einen Absinken des pH-Wertes, RÖDELSBERGER et al. (1992).

Denitrifikanten sind fakultative anaerobe Bakterien, SCHLEGEL (1992), deren repräsentative Vertreter die Arten *Pseudomonas Denitrificansm Thiobacillus Tenitrificans, Pseudomonas Aeruginosa, Gallionella Ferruginea, Bacillus Licheniformis, Serratia Liquefaciens* und *Avidovorax-Gruppen* sind. Weitere Details sind in ZUMFT (1997) enthalten.

Chemo-lithotrophe Denitrifikation

Sulfidische Verbindungen fungieren als Elektronendonatoren bei der chemo-lithotrophen Denitrifikation. Für die Eisensulfid-Form Pyrit lautet die allgemeine stöchiometrische Formel, KÖLLE (1999):

- Teilschritt 1 -

$$5FeS_2 + 14NO_3^- + 4H^+ \rightarrow 7N_2 + 10SO_4^{2-} + 5Fe^{2+} + 2H_2O \qquad (2-8)$$

beziehungsweise:

$$5FeS_2 + 14NO_3^- + 2H_2O + 4CO_2 \rightarrow 7N_2 + 10SO_4^{2-} + 5Fe^{2+} + 4HCO_3^- \qquad (2-8a)$$

Entsprechend der Stöchiometrie werden von 1mg (NO_3^-) etwa 0,369 mg S_2^{2-} oxidiert. Das so entstandene zweiwertige Eisen kann in einem weiteren Schritt als Eisenoxidhydroxid (FeOOH) ausgefällt werden:

- Teilschritt 2 -

$$10Fe^{2+} + 2NO_3^- + 14H_2O \rightarrow N_2 + 10FeOOH + 18H^+ \qquad (2-9)$$

Beide Teilschritte kombiniert ergeben APELLO & POSTMA (1996):

$$2FeS_2 + 6NO_3^- + 2H_2O \rightarrow 3N_2 + 4SO_4^{2-} + 2FeOOH + 2H^+ \qquad (2-10)$$

ΔG_r^0 = -415,84 kJ·mol^{-1} NO_3^-

bzw.: $2FeS_2 + 6NO_3^- + 2HCO_3^- \rightarrow 3N_2 + 4SO_4^{2-} + 2FeOOH + 2CO_2$ (2 – 10a)

Läuft nur der erste Reaktionsteil ab, ist mit einem Anstieg des pH-Wertes zu rechnen. Der pH-Wert wird reduziert, wenn auch der 2. Teilschritt wirksam abläuft. Da der erste Teilschritt die höhere Energieausbeute liefert, als der 2. Schritt, läuft die Gesamtreaktion meist unvollständig ab. Aus diesem Grunde werden bei Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation meist ansteigende Konzentrationen an gelöstem Eisen und Sulfat beobachtet HOUBEN (2000). Als Bakterien sind vor allem *Thiobacillus Denitrificans* und *Thiobacillus Ferrooxidans* beteiligt.

Sulfat kann allerdings ebenfalls reduziert werden RÖDELSBERGER et al. (1992):

$15C_{org} + 8SO_4^{2-} + 4FeOOH + 6H_2O + CO_2 \rightarrow 4FeS_2 + 16HCO_3^-$ (2 – 11)

Ist gelöster Sauerstoff vorhanden, so ist auch der Ablauf einer aeroben Pyritoxidation möglich, siehe beispielsweise HOUBEN (2000), der diverse Quellen aufführt:

$4FeS_2 + 15O_3^- + 16HCO_3^- \rightarrow 8SO_4^{2-} + 4FeOOH + 6H_2O + 16CO_2$ (2 – 12)

Obligate Zwischenprodukte der Denitrifikation

Beim Ablauf einer vollständigen Denitrifikation werden alle Teilschritte und Zwischenstufen, die mit der Bildung der folgenden Zwischenprodukte verbunden sind, durchlaufen.

NO_2: Nitrit tritt im Grundwasser nur selten in höheren Konzentration (>1 mg·l^{-1}) auf, KÖLLE (2001). Ursache für NO_2^- infolge von Denitrifikation sind vermutlich „Nitratreduzierer“, die die Denitrifikation nur bis zum Nitrit ausführen, ROHMANN & SONTHEIMER (1985).

NO: Beispielsweise bei Versuchen von BETLACH et al. (1981) und MCKENNEY et al. (1982) wird NO akkumuliert und über eine Dauer von mehreren Stunden nachgewiesen. Bei mehreren Monaten Versuchsdauer wird die NO-Bildung deshalb häufig als unbedeutend eingestuft.

N_2O: Lachgas ist ein atmosphärisches Spurengas, welches als „Treibhausgas“ fungiert und die Ozonschicht schädigt, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998), van GROENINGEN et al. (2005). Lachgas (N_2O) entsteht als Zwischenprodukt der Nitrifikation und Denitrifikation und stammt zu 90% aus dem Boden, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998). Der Anteil des Lachgases an der gesamten Gasproduktion (N_2O und N_2) für die Denitrifikation ist von folgenden Faktoren abhängig:

- Dem pH-Wert; der N_2O-Anteil steigt mit abnehmenden pH-Wert, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998).
- Der Temperatur; die anteilig maximale N_2O-Bildung erfolgt im Bereich von 4…8°C, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998)
- Der Konzentration gelösten Sauerstoffs; wobei der N_2O-Anteil mit steigendem Sauerstoffgehalt zunimmt, MCSWINEY et al. (2001), BETLACH et al. (1981).
- Dem Nitratgehalt; der N_2O-Anteil steigt mit zunehmendem Nitratgehalt, beispielsweise BLACKMER & BREMNER (1978), FIRESTONE et al. (1980), NÖMNIK et al. (1984).

Voraussetzungen für den Ablauf der Denitrifikation

Für den Ablauf der Denitrifikation müssen neben Nitrat im Grundwasserleiter (1) hydraulisch und biologisch verfügbare Reduktionsmittel zur Verfügung stehen, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998), KÖLLE (1999). Dies können Sulfide (chemo-lithotrophe Denitrifikation) oder organischer Kohlenstoff beispielsweise als partikulärer (TOC) oder gelöster (DOC) Kohlenstoff (chemo-organotrophe Denitrifikation) sein. Häufig sind maximal 50% des vorhandenen Sulfids, KÖLLE et al. (1987) und 2 – 10% des $C_{org.}$, MEHRANFAR (2003) biologisch verfügbar. Eine weitere Voraussetzung ist (2) eine aktive Bioszönose. Wobei davon ausgegangen wird, dass sich die beteiligten Mikroorganismen mit dem nitrathaltigen Wasser von oberflächennahen Zonen mit dem Wassertransport in die Tiefe bewegen. Nitratsauerstoff wird nur bei (3) Abwesenheit, bzw. sehr geringen Gehalten an gelöstem Sauerstoff veratmet. Untersuchungen im Labor geben hierfür Gehalte von maximal 2 $mg \cdot l^{-1}$ O_2 an. Im Aquifer können jedoch bis zu etwa 5 $mg \cdot l^{-1}$ O_2 im Wasser gemessen werden, ohne dass die Denitrifikation verhindert wird, WALTHER (1999). Erklärbar ist dies durch die Ausbildung von O_2-armen, bzw. –freien Bereichen im Biofilm um einzelne Sedimentpartikel, bzw. Porenzwickel, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998). Weitere Faktoren sind (4) die Temperatur der (5) pH-Wert. Angaben zur Temperatur, ab der Denitrifikation stattfinden kann sind unterschiedlich und belaufen sich auf den Bereich zwischen 2°C und 5°C, diverse Autoren, zitiert in MEHRANFAR (2003). Unterschiedlich sind auch die Angaben zum pH-Bereich, wobei ab pH = 3,5 Denitrifikation messbar ist, diverse Autoren, zitiert in MEHRANFAR (2003).

Die Energiefreisetzung ist für den Ablauf der chemo-organotrophen Denitrifikation höher als für die chemo-lithotrophe Denitrifikation. Demnach ist der Ablauf der chemo-organotrophen Denitrifikation thermodynamisch begünstigt. In einigen pleistozänen Grundwasserleitern wird jedoch Nitrat bevorzugt von Eisensulfiden oxidiert, obwohl deutlich mehr organischer Kohlenstoff, beispielsweise als miozäne Braunkohle, enthalten ist, zum Beispiel APELLO & POSTMA (1996), KÖLLE et al. (1987), BÖTTCHER et al. (1991), VAN BEEK (2000).

Bakterielle Fe^{2+} - Oxidation mit Nitrat

STRAUB et al. (1996) beschreiben einen biologischen Prozess von Nitrat und gebundenem Fe^{2+}, der vermutlich nach folgender Stöchiometrie abläuft:

$$10FeCO_3 + 2NO_3^- + 24H_2O \rightarrow 10\ Fe(OH)_3 + N_2 + 10HCO_3^- + 8H^+ \qquad (2-13)$$

$$\text{bzw. } 10Fe^{2+} + 2NO_3^- + 24H_2O \rightarrow 10\ Fe(OH)_3 + N_2 + 18H^+ \qquad (2-13a)$$

in WEBER et al. (2001). Letztere Stöchiometrie wird teilweise auch als 2. Reaktionsteil der chemo-lithotrophen Denitrifikation (2 – 10) geführt, KÖLLE (1999). Als aktive Bakterien wurden *Thiobacillus Denitrificans* und *Pseudomonas Stutzeri* isoliert.

LACK et al. (2002) beschreiben eine anaerobe Biooxidation von Fe(II) mit Nitrat durch *Dechlorosoma Suillum*. In den durchgeführten Laborversuchen entstand bei dieser bakteriellen Oxidation ein je nach Fe-Konzentration Niederschlag von orange/rot bis braun/grau.

Fazit:

In pleistozänen Grundwasserleitern Norddeutschlands, sind von den hier genannten N-Umsatzprozessen die chemo-lithotrophe und die organtrophe Denitrifikation die wirksamsten

Nitratsenken, HOUBEN (2000), KÖLLE (2001), WALTHER (1999), PÄTSCH (2006). Das im Kapitel 4 vorgestellte Untersuchungsprogramm, basiert auf dieser Kenntnis.

2.3 Geochemische Prozesse

2.3.1 Adsorption

Die Fähigkeit zur Anionensorption findet man bevorzugt in Böden, die Al- oder Fe- Oxide oder das vulkanische Verwitterungsprodukt Allophan enthalten SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998). Dabei findet eine Anlagerung der Anionen, beispielsweise NO_3^-, Cl^-, SO_4^{2-}, aufgrund elektrostatischer Kräfte statt SPOSITO (1998). Für die Anionensorption gilt eine starke pH-Wert-Abhängigkeit. Das heißt, mit steigendem pH-Wert nimmt die Menge sorbierbarer Anionen ab. Anionensorption spielt demnach nur in sauren, eisenoxidreichen Böden eine quantitativ wichtige Rolle, GISI et al. (1997) zitiert in HOUBEN (2000). Dieser pH-Effekt ist der zunehmenden positiven Ladung mit sinkendem pH-Wert zuzuschreiben, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998). Nach KÖLLE (2001) ist bei der Verwitterung von Schichtsilikaten (Glimmer) infolge der Aufnahme von Kationen wie Ca^{2+} und Mg^{2+} zur Wahrung der Ladungsneutralität auch mit einer Aufnahme von Anionen, wie Nitrat zu rechnen. Zur Charakterisierung der Adsorption dient der Ladungsnullpunkt der Nettoladung (LNP_{NL}). Er bezeichnet den pH-Wert eines Bodenminerals, bei dem die Nettoladung adsorbierter Ionen verschwindet, SPOSITO (1998). Unterhalb des LNP steigt der Anteil der adsorbierten Anionen, oberhalb werden mehr und mehr Kationen adsorbiert. Für Quarz (SiO_2) liegt der LNP bei pH 2 bis 3. Für die Eisenoxide Goethit (α-FeOOH) und Hämatit (Fe_2O_3) liegt der LNP bei pH 7,5 bis 8,5.

Nach SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998) werden die Ionen NO_3^-, Cl^- und meist auch SO_4^{2-} an Tonmineralen unspezifisch festgelegt. Spezifisch sorbiert werden bevorzugt Phosphat, Molybdat, Silicat, Arsenat, z.T. auch Sulfat und Borat:

Phosphat > Silicat > Molybdat >> Sulfat > Chlorid = Nitrat,

Entsprechend dieser Reihenfolge konkurrieren diese Anionen miteinander.

CLAY et al. (2003) führten Säulenversuche an tonig-schluffigem Lehm mit markiertem ^{15}N- und ^{14}N – Nitrat, sowie Bromid durch. Dabei wurde Bromid mit 0,002 $mg \cdot kg^{-1}$ weniger sorbiert als Nitrat-N mit 0,17 $mg \cdot kg^{-1}$, d.h. k_D = 0,17 bis 0,2 $l \cdot kg^{-1}$ bzgl. NO_3^- - N bei pH = 6,5. Es war dabei keine Isotopendiskriminierung festzustellen.

Fazit:

In den drei, im Folgenden betrachteten Lockergesteinsaquiferen Norddeutschlands ist die Nitratsorption aufgrund des pH-Milieus von pH 4.5 bis 8, vermutlich nur von untergeordneter Bedeutung. Bei der Auswertung der Labor- und Feldversuche könnte allerdings eine Ionensorption für Reaktionsprodukte, wie Sulfat (chemolithotrophe Denitrifikation) oder Ammonium (Nitratammonifikation) von Bedeutung sein. Die Sorption von Ammonium kann, sofern Tonminerale vorhanden sind, bedeutender und schneller sein, als die Nitrifikation, KÖLLE (2001), so dass bei stattfindender Nitrat-Ammonifikation, siehe Abschnitt 2.2.2, das Reaktionsprodukt NH_4^+ nicht zwangsläufig in der Lösung nachgewiesen werden kann.

2.3.2 Chemisch katalysierte Oxidation von Fe^{2+}

Von OTTLEY et al. (1997) wurden 12 verschiedene Reaktionstypen beobachtet, bei denen Cadmium, Nickel, Quecksilber, Blei, Mangan, Kupfer, Zinn oder Silber als Katalysatoren wirken. Als Reaktionsprodukte entstehen dabei neben Eisenhydroxiden (FeOOH), $Fe_6(OH)_x$ bzw. Eisenoxiden (Fe_3O_4) die N-Reaktionsprodukte: N_2, N_2O, NO_2^- oder NH_4^+.

Das niedrigste dafür notwendige Eisen – Nitratverhältnis beträgt 2, wonach $1 mg \cdot l^{-1}$ Nitrat eine Konzentration $1{,}8 mg \cdot l^{-1}$ Fe^{2+} benötigt. Für die hier vorgestellten Untersuchungsgebiete mit einer Konzentration gelösten Gesamt-Eisens von max. 20 $mg \cdot l^{-1}$ (Thülsfelde) könnte dieser Prozess zwar prinzipiell möglich sein. Allerdings wurden weder die Gehalte an Fe^{2+} noch die notwendiger Cu^{2+}, Sn^{2+} oder Ag^{2+} (OTTLEY et al. (1997)) oder Goethit (α-FeOOH) und Lepidokrit (γ-FeOOH), SOERENSEN & THORLING (1991) in den Gebieten bestimmt. Aussagen über die Bedeutung der geochemisch katalysierten Oxidation von Fe^{2+} für die hier vorgestellten Gebiete haben demnach nur hypothetischen Charakter.

2.3.3 Green Rust

Geschichtete Eisenhydroxidsalze werden unter der Bezeichnung „Green Rust“ zusammengefasst, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998). Als Reaktionsprodukte der Reaktion mit Nitrat entstehen u.a. Magnetit, Ammonium und Sulfat nach folgender Stöchiometrie:

$$Fe(II)_4Fe(III)_2(OH)_{12-y}(OH_2)_y(SO_4)_{1+05y} + 0{,}25NO_3^- + (1{,}5+y)OH^-$$

$$\rightarrow 2Fe_3O_4 + 0{,}25NH_4^+ + (1+0{,}5y)\ SO_4^{2-} + (6{,}25+y)H_2O \qquad (2-14)$$

KOCH & HANSEN (1997) führten Nitratreduktionsversuche im Labor mit pH-Werten von 7 bis 8,2 durch. Im Versuchsverlauf kommt es durch den OH^- - Verbrauch zu einem absinken des pH-Wertes. In den von HANSEN et al. (1994) geschilderten Versuchen beträgt die Halbwertszeit für Nitrat bei 20°C im Labor ohne Zugabe von Metallionen als Katalysatoren 16 Tage.

Fazit:

Um das Potential der nicht-biologischen Elimination von Nitrat durch reduzierte Eisenverbindungen oder Eisenhydroxiden beurteilen zu können, ist es notwendig Sedimentproben auf deren Gehalte hin zu analysieren. Dies setzt spezielle Probenahmetechniken voraus, die den Zutritt von Luftsauerstoff komplett ausschließen können. Für die im Untersuchungsgebiet Wehnsen eingesetzte Kernbohrung kann Luftzutritt zwar vermieden, jedoch nicht vollständig ausgeschlossen werden. Andere Probenametechniken sind für die zu untersuchenden Teufen nicht ausreichend etabliert und konnten demzufolge mit dem verfügbaren finanziellen Budget nicht realisiert werden. Deshalb können in dieser Arbeit keine Aussagen getroffen werden, welche Bedeutung der geochemische Umbau für die Elimination von Nitrat im Grundwasserleiter hat.

3 Beschreibung der Untersuchungsgebiete

3.1 Überblick

Ziel der Vorstellung der Untersuchungsgebiete ist es, anhand von geologischen, hydrologischen und wasserwirtschaftlichen Gegebenheiten Gemeinsamkeiten und Unterschiede der Grundwasserleiter darzustellen. Die geografische Lage der Gebiete ist Abbildung 3-1 zu entnehmen.

Abbildung 3-1: Geografische Lage der Untersuchungsgebiete

In Tabelle 3-1 sind ausgewählte Informationen zu den einzelnen Untersuchungsgebieten gegenübergestellt. Teilweise handelt es sich dabei um überschlägige Werte, die lediglich eine Vorstellung des Gebietes vermitteln sollen. Detaillierte Angaben enthält die angegebene Literatur.

Bei allen drei Untersuchungsgebieten handelt es sich um quartäre Lockergesteinsaquifere der norddeutschen Tiefebene. Die Landnutzung erfolgt überwiegend landwirtschaftlich. Da vermutlich vorhandene Untersuchungsergebnisse aus der landwirtschaftlichen Zusatzberatung hier nicht ausgewertet wurden und keine weiteren Informationen vorliegen, muss zu Beginn von einer mengenmäßig ähnlichen Nitratzufuhr über den Zeitraum von 1960/70 bis mindestens Mitte der 90er Jahre ausgegangen werden. Diese spiegelt sich im oberflächennahen Grundwasser wieder und liegt im Mittel bei 150 $mg \cdot l^{-1}$ Nitrat, siehe auch Kapitel 5. In den letzten Jahren erfolgte zum Teil eine Umstellung einzelner Flächen auf grundwasserschonende Landbewirtschaftung mit geringeren Stickstoff-Einträgen.

Tabelle 3-1: Vergleich der Untersuchungsgebiete[1)]

Untersuchungs-gebiet	Wehnsen Brunnen F5 und F6	Thülsfelde Fassungen A bis E	Sulingen
maximale und mittlere Aquifermächtigkeit	max. 120 m 30 …50 m	max. 170 m 150 m	max. 50m 20 ….30 m
Typ	gespannt/frei	frei	frei
Hydraulisch aktives Sediment [2)]	Grob- und Mittelsande, Kies, Saale-/ Elster-, z.T. Weichselkaltzeit, Schluff-einlagerung des Drenthe-Stadiums	Mittelsande, Saale- z.T. Weichselkaltzeit	Grob-/Mittelsande, Fein-sande, Saalekaltzeit (Drenthe-Stadium), lokale Einlagerung tertiären Schluffs
GW-Flurabstände	2 m bis 12 m	1 m bis 8 m	6 m bis 9 m
Fläche des Ein-zugsgebietes	ca. 10 km²	ca. 80 km²	ca. 10 km²
Niederschlag	694 $mm \cdot a^{-1}$	794 $mm \cdot a^{-1}$	670 $mm \cdot a^{-1}$
Grundwasser-neubildung	140 … 200 $mm \cdot a^{-1}$	300$mm \cdot a^{-1}$ (Wald) 350 $mm \cdot a^{-1}$ (LW)	170 $mm \cdot a^{-1}$ (LW)
Hydraul. Gefälle	1:500 bis 1:1000	1:300 bis 1:1000	1 : 1000
Landnutzung	ca. 20% Wald ca. 70% LW ca. 10% Siedlung	38 % Wald 56 % LW 6 % Siedlung	>90 % LW, Rest: Wald, Siedlg.
Bewilligte Entnah-memenge	ca. 1,5 Mio $m^3 \cdot a^{-1}$ (für F1, F5 & F6)	ca. 15 Mio $m^3 \cdot a^{-1}$ (alle Fassungen)	ca. 1,6 Mio $m^3 \cdot a^{-1}$
Quellenangaben	WV PEINE (1998)	ETMANN (1991), PÄTSCH (2006), JOSOPAIT (1990)	WV SULINGER LAND (2003)

[1)] die Werte dienen einer Überblicksdarstellung und sind teilweise gerundet, für detaillierte Angabe sind die angegebenen Quellen zu konsultieren, [2)] hier definiert mit $K \geq 10^{-6}$ $m \cdot s^{-1}$
LW . .. Landwirtschaft, Niederschlag: langjähriges Mittel

3.2 Wehnsen

Das Untersuchungsgebiet liegt etwa 10 km nordöstlich von Peine, befindet sich auf den Burgdorf-Peiner Geestplatten und umfasst die Einzugsgebiete der Brunnen F5 und F6, siehe Abbildung 3-2. Angegeben ist in dieser Darstellung die Lage der Messstellen, die 2004 neu

gebohrt worden sind und deren Profile in Anlage 1, Blatt 1-1 bis 1-6 dargestellt sind. An sämtlichen dargestellten Messstellen wurden Messungen der Wasserbeschaffenheit und Gasgehalte durchgeführt, siehe Kapitel 5.

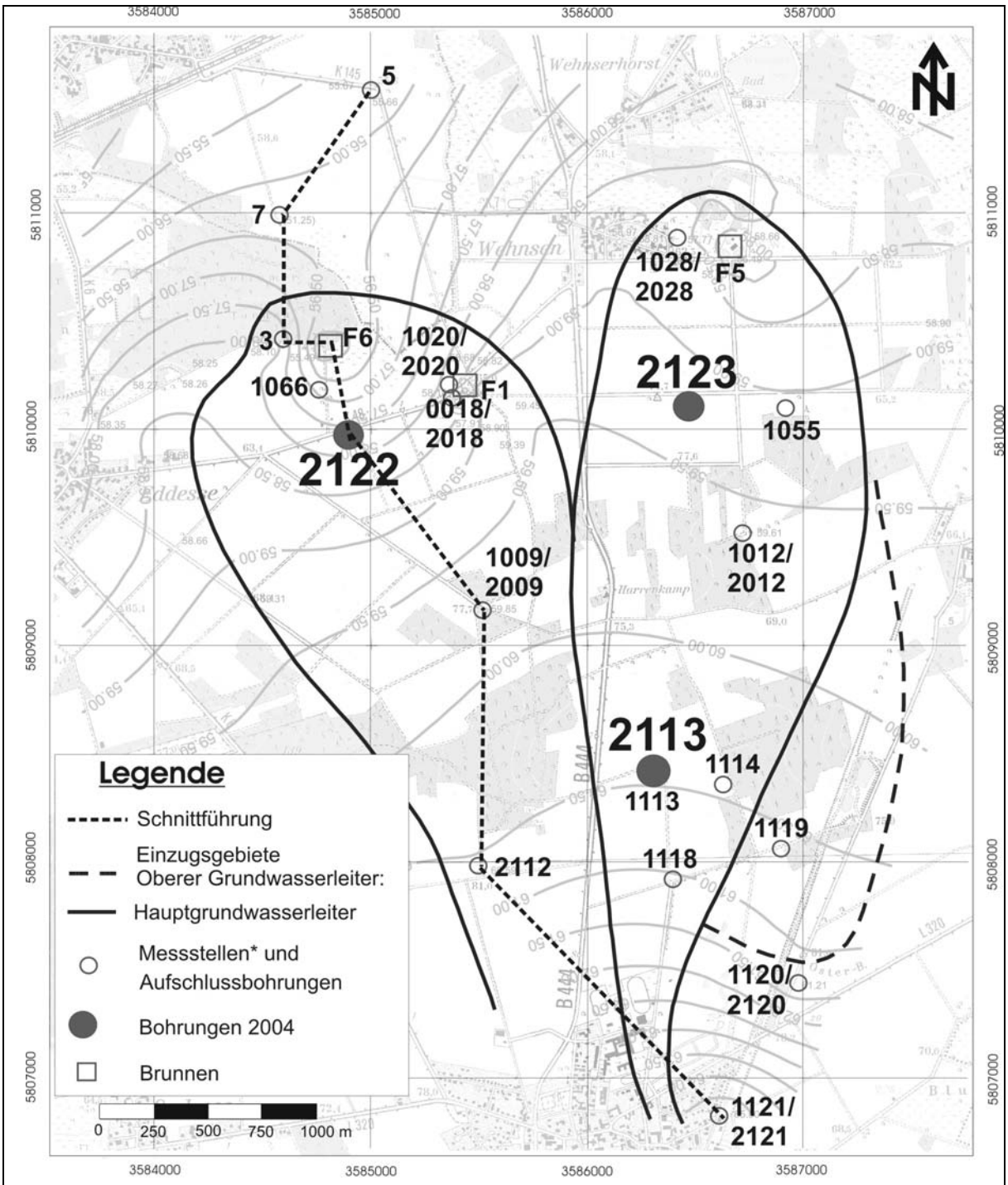


Abbildung 3-2: Untersuchungsgebiet im Anstrom der Förderbrunnen F5 und F6 im EZG des WW Wehnsen

Der Untergrund ist stark heterogen, siehe Darstellungen in Anlage 1, Blatt 1-1 bis Blatt 1-6 und Blatt 1-9. Die folgenden Ausführungen stammen aus WV PEINE (1998): Im südlichen Teil des Gebietes befindet sich eine aus saale-/elsterzeitlichem Material bestehende Hochfläche, die Edemisser Geest. Der Teil, nördlich der Entnahmebrunnen, ist ein Niederungsgebiet, mit Ablagerungen von weichselzeitlichen Sanden und Kiesen der Niederterasse. Das Grundwasserleitersystem wird von der Schichtenfolge des Quartärs, glazifluviatiler und fluviatiler Lockergesteine, im Mittel etwa 30 - 50 m mächtig, gebildet. Dieses System wird durch mehrere Schichten von schluffig-tonigem Material (Drenthe-Stadium) getrennt, da diese aufgrund ihrer geringen hydraulischen Leitfähigkeit als Grundwasserstauer fungieren. Diese Grundwasser stauenden Schichten verlaufen nicht durchgehend, so dass es stellenweise einen mächtigen Grundwasserleiter gibt. Generell gibt es im Untersuchungsgebiet einen Hauptgrundwasserleiter, der in den Bereichen einer durchgehenden grundwasserstauenden Schicht in ein oberes und in ein unteres Grundwasserstockwerk geteilt wird. Das obere Grundwasserstockwerk ist im Mittel zwischen 5 und 35 m mächtig,

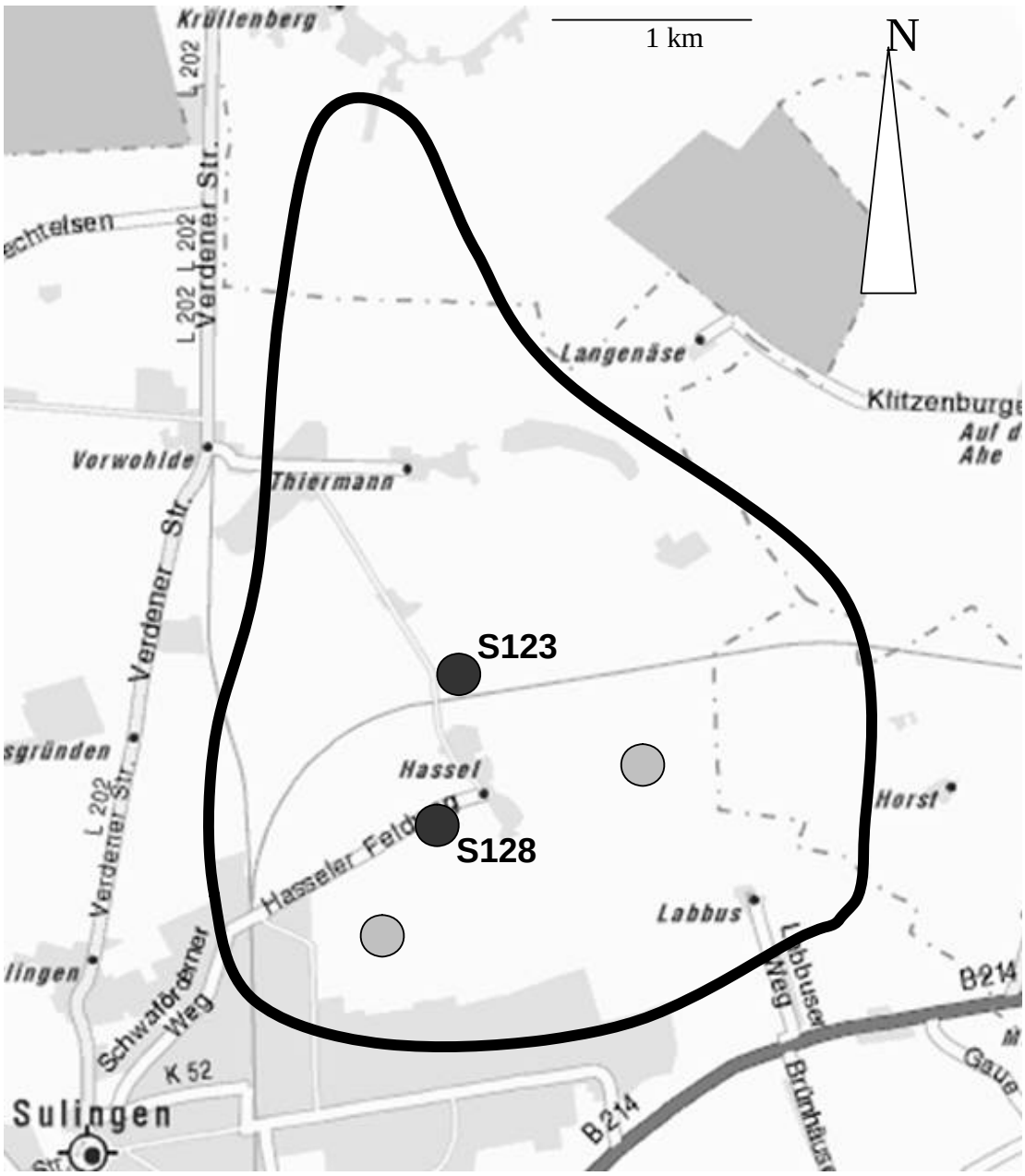
Die Basis des Aquifers weist ein starkes Relief auf und befindet sich etwa bei 15 bis -60 mNN. Das liegende Tertiär besteht aus gering wasserdurchlässigen schluffig-tonigen Sedimenten, so dass die Quartär-Basis damit als Grundwassersohlschicht des Aquifers angesehen werden kann.

Im Wasserschutzgebiet Wehnsen wird auf leichten Böden intensiver Ackerbau bei gleichzeitiger Feldberegnung betrieben. An vereinzelten Grundwassermessstellen werden sehr hohe Nitratwerte (β_{NO3} > 100 mg·l^{-1}) nachgewiesen; der überwiegende Teil der Messstellen weist, besonders in großen Tiefen, noch eine niedrige Konzentration (β_{NO3} < 1 mg·l^{-1}) auf, siehe dazu auch Kapitel 5.

3.3 Sulingen

Tonig-schluffige Sedimente des Tertiärs bilden die Basis des quartären Grundwasserleiters. Dieser besteht aus einer etwa 50 m mächtigen Schichtenfolge aus Kiesen und Sanden des Drenthe-Stadiums der Saale-Kaltzeit. Dabei sind etwa in der tiefer liegenden Hälfte des Aquifers Grobsande und Kiese zu finden, die im Hangenden durch eine Schicht schluffigen Feinsandes, von maximal einigen Metern Mächtigkeit begrenzt werden. Der Aquifer über dieser Schicht ist durch fein- bis mittelkörnigen Sand gekennzeichnet, in den lokal begrenzt Schuppen tertiären, bindigen Sedimentes eingelagert sind. Eine schluffig-tonige Geschiebelehmdecke mit mehreren Metern Mächtigkeit lagert über dieser Schicht. Ein geologischer Schnitt, der auch das Einzugsgebiet des Wasserwerkes Sulingen enthält, ist in Anlage 1 Blatt 1-10**,** entnommen und ergänzt aus Wasserverband SULINGER LAND (2003), enthalten.

Die Lage des Einzugsgebietes des Wasserwerkes Sulingen ist in Abbildung 3-3 schematisch dargestellt. Im Rahmen von Untersuchungen zum Nitratumsatz im Aquifer wurden 2004 die beiden Bohrungen S123 und S128 abgeteuft, deren Schichtenprofile in Anlage 1, Blatt 1-7 und 1-8 enthalten sind. Beide Profile zeigen den Wechsel von Fein- und Mittelsanden unterhalb von 4 m u GOK. Im Unterschied zum Gebiet Wehnsen, liegt hier ein ungespannter Grundwasserleiter vor, der keine ausgeprägte Stockwerkstrennung aufweist.



	grobe Abgrenzung des Einzugsgebiets		Wald
	Wasserfassungen		Siedlungsfläche
	Bohr- und Messstandorte		Acker & Sonstiges

Abbildung 3-3: Wassereinzugsgebiet Sulingen, schematisch

3.4 Thülsfelde

Die Lage der Fassungen des Wasserwerkes Thülsfelde und deren Einzugsgebiete sind in Abbildung 3-4 dargestellt.

Der Grundwasserleiter ist bis zu 170 m mächtig und wird durch gering durchlässige, schluffige Schichten des Tertiärs begrenzt, siehe Anlage 1, Blatt 1-11. Der Aquifer im Einzugsgebiet der Fassungen besteht vorrangig aus glazifluviatilen Sanden der Saale-Kaltzeit. Die im Süden des Einzugsgebietes nahezu geschlossene Geschiebelehmdecke löst sich nach Norden hin auf. Im Norden und Westen der Talsperre Thülsfelde stehen Sande an, die der Weichsel-Kaltzeit zugeordnet werden. Detailliertere Ausführungen zur Geologie sind beispielsweise in JOSOPAIT (1990), PÄTSCH (2006) und ETMANN (1991) zu finden.

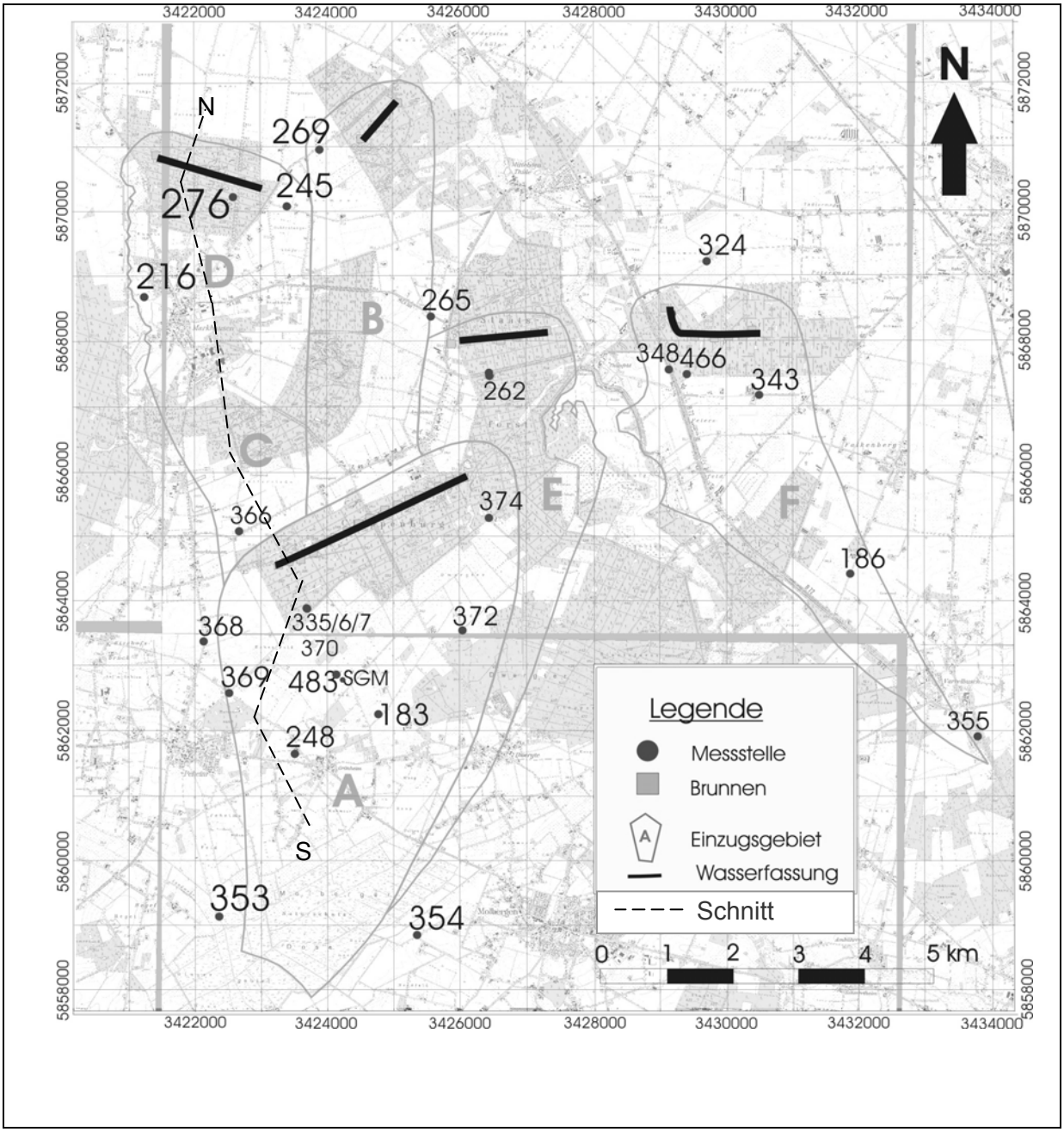


Abbildung 3-4:: Wasserfassungen des EZG Thülsfelde mit Messstellen der Gasanalysen

4 Untersuchungen im Labor

4.1 Stoffliche Charakteristik der Sedimentproben

4.1.1 Ziele

Die Ziele der Bohrgutanalyse sind im Folgenden präzisiert aufgeführt:

(a) Erfassen des Gehaltes und der räumlichen Verteilung von Reduktionsmittel im Untergrund:

Potentielle Reduktionsmittel der festen Phase für die Denitrifikation sind organischer Kohlenstoff und sulfidische Verbindungen. Mit diesen Parametern kann abgeschätzt werden ob, in welchen räumlichen Bereichen und in welchem Umfang Denitrifikation - unabhängig von der hydraulischen und biologischen Verfügbarkeit der Reduktionsmittel, dem Redoxmilieu, denitrifizierenden Mikroorganismen und dem Vorhandensein von Nitrat - potentiell möglich ist oder nicht.

Anhand der Art der Reduktionsmittel, Schwefel- oder Kohlenstoffverbindungen, können Aussagen über die Art der potentiell möglichen Denitrifikation, chemo-lithotroph oder chemo-organotroph, getroffen werden. Die Gehalte an Reduktionsmitteln wurden Literaturwerten vergleichbarer Grundwasserleiter gegenübergestellt, um eine relative Bewertung der potentiell möglichen Denitrifikation für Wehnsen und Sulingen zu ermöglichen.

(b) Beschreiben der hydraulischen Verfügbarkeit der Reduktionsmittel:

Die Bohrprofile der Standorte im Gebiet Wehnsen, siehe Anlage 1, Blatt 1-1 bis 1-6, zeigen eine starke geologische Schichtung, die von hydraulisch passiven Bereichen (Mergel und Ton) bis zu hydraulisch aktiven Bereichen (Grobsanden und Kiesen) reicht, siehe auch Kapitel 3. Für die Wassergüte ist die Denitrifikation in hydraulisch aktiven Bereichen, definiert mit $K \geq 10^{-6}$ $m \cdot s^{-1}$, siehe beispielsweise LANGGUTH & VOIGT (1988), von Bedeutung. Es wurde deshalb anhand von Sieblinien die hydraulische Leitfähigkeit der Sedimentproben bestimmt, um zu prüfen, ob und in welchem Umfang potentielle Reduktionsmittel in hydraulisch aktiven Sedimenten zur Verfügung stehen. Die Bohrprofile der Standorte in Sulingen zeigen einen vergleichsweise homogenen Aufbau aus Fein- bis Grobsanden, siehe Anlage 1, Blatt 1-7 und 1-8.

Die Untersuchungen boten in diesem Zusammenhang folgende Möglichkeiten:

(c) Ausweisen von Indikatoren für den Gehalt an Reduktionsmitteln

Eine Analyse der Reduktionsmittel organischer Kohlenstoff und Sulfid-Schwefel ist meist zeit- und kostenaufwendig. Anhand der vorliegenden Datensätze aus den Gebieten Wehnsen und Sulingen sollte versucht werden, diese Parameter über geeignete Regressionsgleichungen mit den einfacher zu bestimmenden Glühverlust und Gesamtschwefel zu berechnen. Als Arbeitshypothese wurde der Glühverlust als Indikatorparameter für den TOC und der Gehalt an Gesamtschwefel als Indikatorparameter für den Sulfidschwefel betrachtet, siehe PÄTSCH (2006). Besteht zwischen den jeweiligen Parametern eine signifikante Korrelation, so wurde geprüft, ob:

- mit dem Parameter Glühverlust der TOC-Gehalt über eine einfache, lineare Regressionsgleichung abgeschätzt werden kann,

- mit dem Parameter Gesamt-Schwefel der Sulfidschwefel-Gehalt über eine einfache, lineare Regressionsgleichung abgeschätzt werden kann und
- die aufgestellten Regressionsgleichungen auf der Basis von Werten aus Sulingen und Wehnsen auch für die Daten aus Thülsfelde, PÄTSCH (2006), gelten.

(d) Bewerten der Aussagekraft von Parametern aus gestörten Proben der Spülbohrungen durch einen Vergleich mit Proben der Kernbohrungen

Im Gebiet Wehnsen wurden an drei Standorten sowohl Spül-, als auch Kernbohrungen abgeteuft, siehe Anlage 1, Blatt 1-1 bis 1-6. Durch dieses Vorgehen lagen von etwa 60 Bohrmetern sowohl gestörte, als auch ungestörte Proben vor, deren analysierte Parameter verglichen werden konnten. Durch einen Vergleich der analysierten Parameter aus Spül- und Kernbohrung kann abgeleitet werden, inwieweit Parameter des gestörten Bohrgutes aussagkräftig sind.

(e) Charakterisieren des organischen Kohlenstoffs

Der Gesamtgehalt des organischen Kohlenstoffs (TOC) ist vermutlich nicht vollständig biologisch verfügbar. Die Parameter „löslicher organischer Kohlenstoff“ (DOC_l), „heißwasserlöslicher Kohlenstoff“ (C_{HWL}) und „labiler Kohlenstoff“ (C_l) können Indikatoren des biologisch verfügbaren Kohlenstoffs sein und wurden deshalb für einzelne Proben bestimmt.

4.1.2 Methoden und Vorgehensweise

Für die vorliegende Arbeit stand sowohl gestörtes, als auch ungestörtes Bohrgut von insgesamt 2 Standorten des Gebietes Sulingen und drei Standorten des Gebietes Wehnsen zur Verfügung. Das Bohrprogramm wurde im Kapitel 1.3 beschrieben. Im Rahmen dieser Arbeit wurden keine Laboruntersuchungen an Gesteinsmaterial aus Thülsfelde durchgeführt, dazu sei auf die Arbeit von PÄTSCH (2006) verwiesen.

Die Sedimentproben aus der Spülbohrung, jeweils eine gestörte Probe pro Meter Bohrteufe, wurden vor Ort in PVC-Dosen gefüllt und in den Kühlzellen des Institutes für Grundwasserwirtschaft bei 10°C bis zur Analyse gelagert.

Die Kernproben wurden in PVC-Linern, von je 1 Meter Länge, gewonnen. Diese wurden unmittelbar nach der Entnahme mit PVC-Kappen und Klebeband dicht verschlossen und im jeweiligen Wasserwerk bei etwa 10°C bis zum Transport ans Institut gelagert. Bis zur Analyse erfolgte die Lagerung ebenfalls in den Kühlzellen bei konstant 10°C.

Der Inhalt eines Bohrkerns wurde unter Gasatmosphäre (N_2) durch Viertelung, siehe beispielsweise LANGGUTH & VOIGT (1988), gemischt beziehungsweise homogenisiert. Teile dieser Mischprobe wurden für die Batchversuche, siehe Kapitel 4.2 und für die Analyse der bodenphysikalischen und –chemischen Parameter verwendet.

Zur **Erfassung der vertikalen Verteilung der Reduktionsmittel**, wurden am Bohrgut der Glühverlust, der Gehalt organischen Kohlenstoffs und der Gehalt der Schwefel-Spezies untersucht, siehe Tabelle 4-1. Diese Parameter werden teilweise in [%] angegeben, womit der Bezug zur Masse der trockenen Sedimentprobe gemeint ist. Die Ergebnisse werden in Vertikalprofilen dargestellt, siehe Abbildung 4-1 und Anlage 2, Blatt 2-15 und 2-16.

Für eine Bewertung der **hydraulischen Verfügbarkeit der Reduktionsmittel** wurden Sieblinien zur Bestimmung des Feinkornanteils und des K-Wertes durchgeführt. Die Sieblinien

sind für Wehnsen in WALTHER et al. (2005) und für Sulingen in WALTHER et al. (2005a) dokumentiert. In Relationsdiagrammen wurden die Gehalte an TOC und Sulfid-Schwefel den ermittelten K-Werten gegenübergestellt. Zur Quantifizierung eines möglichen Zusammenhangs zwischen K-Wert und Reduktionsmittelgehalt wurde jeweils der Korrelationskoeffizient berechnet. An den Bohrlöchern wurden geophysikalische Messungen, Gamma-Ray und FEL, durchgeführt. Diese sind in Abbildung 4-1 und Anlage 2, Blatt 2-15 und 2-16 dargestellt und in WV Peine (2004) dokumentiert Die geophysikalischen Untersuchungen dienten der Absicherung der Sedimentansprache, insbesondere der Ausweisung geringmächtiger Toneinlagerungen im Aquiferbereich, siehe beispielsweise Abbildung 4-1. Die Analysemethoden sind in Anlage 2, Blatt 2-1f. beschrieben. Die Gehalte an TOC, Sulfid-S und der Glühverlust der Sedimentproben aus dem Gebiet Wehnsen wurden als absolute Werte und als logarithmierte Werte (zur Basis e) mit dem Kolmogorov-Smirnov-Test auf Normalverteilung getestet. Die Zuordnung der Proben zu den Bohrungen bzw. der entsprechenden Teufe ist in Anlage 6 für die 3 Gebiete zusammengestellt.

Tabelle 4-1: Anzahl der durchgeführten Analysen am Bohrgut

Gebiet	**Sulingen**	**Wehnsen**	
Bohrung	**Kernbohrung**	**Spülbohrung**	**Kernbohrung**
Gamma – Ray[4]	2 (100)*	3 (164)*	-
FEL[4]	2 (88)*	3 (112)*	-
K-Wert	60	157	28
Feinkornanteil	29	170	61
Glühverlust	29	174	57
TOC[1]	28	174	-
DOC[2]	-	63	-
C_{HWL}[2]	-	63	-
C_L[2]	-	63	-
S_{gesamt}[1,3]	4	20	58
Sulfid-S[3]	4	-	58
Sulfat-S[3]	4	-	58

[1] Analytik durch Institut für Wasserchemie der TUD
[2] Analytik teilweise durch das Dep. Für Nutzpflanzwissenschaften, Abt. Agrarpedologie der Universität Göttingen
[3] Analytik durch das Institut für Umweltgeologie der TU Braunschweig
[4] Daten vom Ingenieurbüro Rogge & Co. Hydrogeologie GmbH im Auftrag der Wasserverbände

* Anzahl der verwendeten Messwerte

Indikatorparameter für die Gehalte an Reduktionsmitteln wurden auf der Basis des Korrelationskoeffizienten nach Spearman (r_s) und über lineare Regressionsgleichungen ausgewiesen. Die Güte der Anpassung von Regressionsgleichungen wurde mit den Kriterien in „Häufig verwendete Formeln“ Blatt vii bewertet.

Ein **Vergleich der Ergebnisse an Proben aus Spül- und Kernbohrung** erfolgte über die Darstellung in Relationsdiagrammen. Zusammenhänge wurden über die Berechnung des Korrelationskoeffizienten (r_s) quantifiziert.

Die **Charakterisierung des organischen Kohlenstoffs** einer Sedimentprobe kann durch verschiedene Parameter, zum Beispiel den löslichen organischen Kohlenstoff (DOC_l), den labilen Kohlenstoffanteil (C_l) oder den heißwasserlöslichen Kohlenstoff (C_{HWL}) erfolgen. Diese C-Fraktionen werden in der Literatur hinsichtlich ihrer mikrobiellen Verfügbarkeit unterschiedlich bewertet, siehe MEHRANFAR (2003). Der DOC_l ist hier die Menge an organischem Kohlenstoff, die mittels $CaCl_2$ aus einer Sedimentprobe gelöst werden kann. Der labile Kohlenstoffanteil (C_l), ist die mit $KMnO_4$ oxidierbare Kohlenstoffmenge, siehe auch BLAIR et al. (1995) und LOGINOW et al. (1987) und gilt als Indikator für die biologische Aktivität eines Se-

dimentes. Der heißwasserlösliche Kohlenstoff (C_{HWL}) wird durch Kochen der Sedimentprobe gewonnen. Dieser Wert gibt Auskunft über die C-Verfügbarkeit für Mikroorganismen, SPARLING et al. (1998). Die Analysemethoden der einzelnen Parameter sind Anlage 2, Blatt 2-1 und Blatt 2-2 beschrieben.

4.1.3 Ergebnisse

4.1.3.1 Vertikale Verteilung von Reduktionsmitteln

Die gemessenen Werte der Gehalte an Reduktionsmitteln sind in Anlage 2, Blatt 2-4 bis Blatt 2-13 enthalten. Mittelwerte und Spannweiten der Gehalte an TOC, Sulfidschwefel und des Parameters Glühverlust sind für die Bohrungen in Wehnsen und Sulingen in Tabelle 4-2 angegeben.

Tabelle 4-2: Mittlere Gehalte und statistische Parameter von Reduktionsmitteln

Bohrung / Parameter	Wehnsen				Sulingen		
	W2113	W2122	W2123	Gesamt[2)]	S123	S128	Gesamt[2)]
TOC [%][1)]							
Mittelwert	(0,139)	(0,176)	(0,085)	(0,132)	0,021	0,018	0,020
n	58	58	51	167	15	15	30
Minimum	(0,015)	(0,037)	(0,015)	(0,015)	0,013	0,011	0,011
Maximum	(0,800)	(0,501)	(0,395)	(0,800)	0,048	0,049	0,049
s	(±0,170)	(±0,139)	(±0,074)	(±0,132)	±0,011	±0,012	±0,012
Sulfid-S [%][1) 3)]							
Mittelwert	0,220	0,088	0,127	0,157	0,039	0,027	0,033
n	26	17	15	58	2	2	4
Minimum	0,003	0,005	0,044	0,003	0,009	0,006	0,006
Maximum	0,849	0,331	0,326	0,849	0,068	0,047	0,068
s	±0,213	±0,094	±0,069	±0,164	--	--	±0,030
Glühverlust [%][1)]							
Mittelwert	1,552	0,900	0,633	1,116	0,640	0,721	0,679
n	58	58	51	167	15	15	30
Minimum	0,300	0,300	0,200	0,200	0,300	0,300	0,300
Maximum	4,600	2,700	1,300	4,600	1,100	1,300	1,300
s	±1,245	±0,660	±0,339	±0,990	±0,290	±0,264	±0,276

[1)] Prozentangaben: Masse der Substanz bezogen auf die trockene Masse der Sedimentprobe
[2)] Mittlere Gehalte und statistische Parameter aus den Werte aller neu abgeteuften Bohrungen
[3)] Für Sulingen liegen pro Bohrung nur Werte der S-Spezies nur für 2 Teufen vor
() Werte von Proben aus der Spülbohrung, s…Standardabweichung

Der Gehalt reaktiven Materials, sowohl TOC als auch Sulfid, ist im Gebiet Wehnsen demnach deutlich höher als im Gebiet Sulingen. Die vertikale Verteilung der Parameter Gamma-Ray, FEL, K-Wert, Glühverlust, TOC und S-Spezies ist für die Bohrungen in Wehnsen in Abbildung 4-1 und in Anlage 2, Abbildung A2-1 (Blatt 2-15) und Abbildung A2-2 (Blatt 2-16) dargestellt. Hinzugefügt sind die Parameter der Grundwasserbeschaffenheit gelöster Sauerstoff und Nitrat für Messstellen des Untersuchungsgebietes Wehnsen. Je nach angesetzter Irrtumswahrscheinlichkeit konnte für alle Parameter eine Normal- bzw. Log-Normalverteilung mit dem Kolmogorov-Smirnov-Test abgesichert werden, siehe Anlage 4, Tabelle a4-3 und Tabelle A4-4, Blatt 4-4.

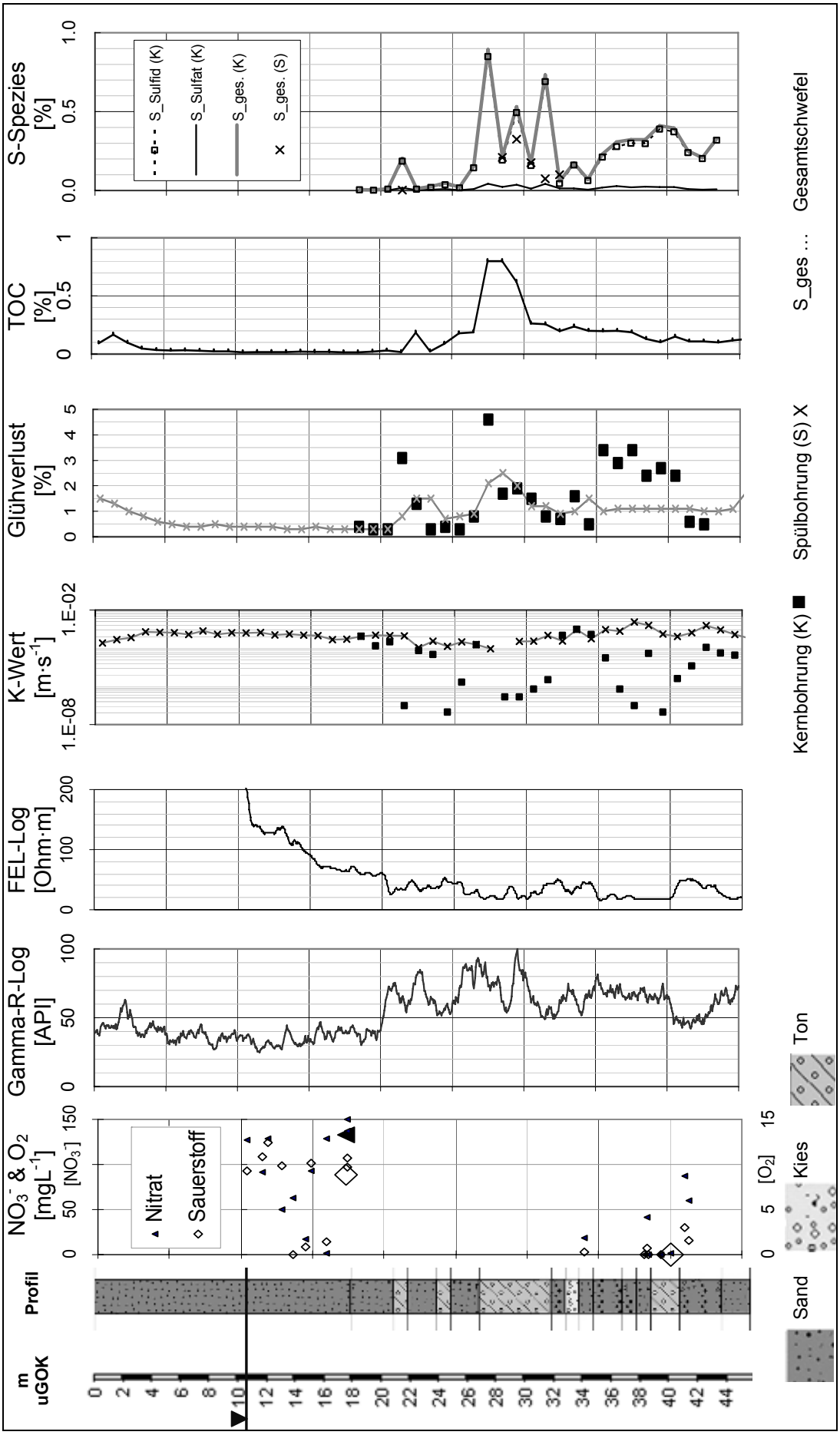
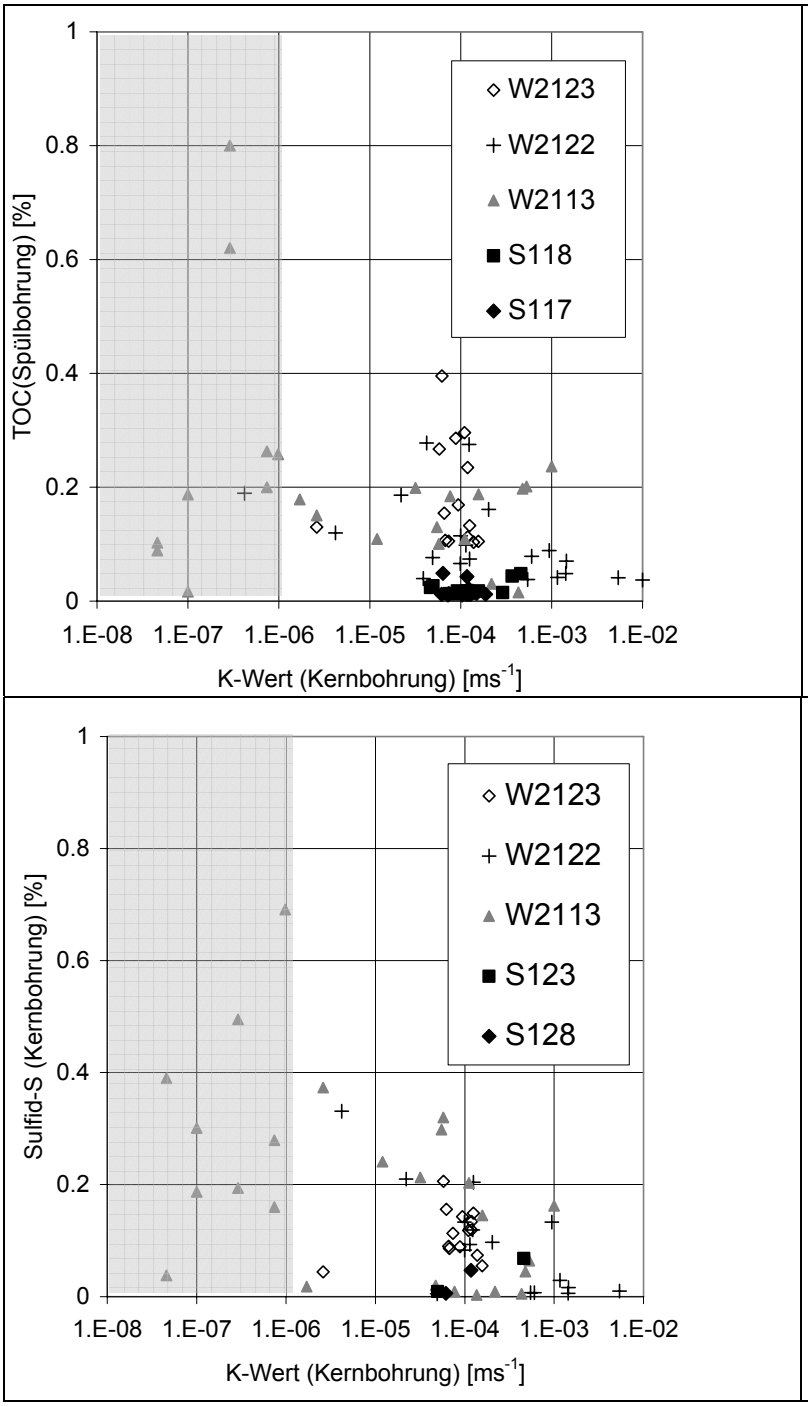


Abbildung 4-1: Vertikalprofile für Spül- und Kernbohrung W2113 in Wehnsen

4.1.3.2 Hydraulische Verfügbarkeit der Reduktionsmittel

Die Abbildung 4-2 zeigt die Gehalte an TOC (oben) und Sulfid-S (unten) in Relation zur hydraulischen Leitfähigkeit K. Die untersuchten Sedimente aus Sulingen sind mit $K \geq 10^{-6}$ $m \cdot s^{-1}$ ausschließlich hydraulisch aktiv. Die Gehalte an Reduktionsmitteln hydraulisch aktiver Bereiche entsprechen für die Standorte in Sulingen somit den Werten in Tabelle 4-2. Für Wehnsen betragen die Mittelwerte der Reduktionsmittel in hydraulisch aktiven Bereichen: TOC = 1336 $mg \cdot kg^{-1}$ (n = 49, s = ± 882 $mg \cdot kg^{-1}$) und S_2^{2-} = 1053 $mg \cdot kg^{-1}$ (n = 49, s = ± 835 $mg \cdot kg^{-1}$), siehe Abbildung 4-2.



W…Standort Wehnsen.
S…Standort Sulingen

W…Standort Wehnsen.
S…Standort Sulingen

Abbildung 4-2: K-Wert, TOC und Sulfid-Schwefel

4.1.3.3 Indikatoren für Reduktionsmittel

Die Korrelationskoeffizienten, die Regressionsgleichungen und die entsprechenden Parameter zur Beurteilung der Güte der Schätzung sind in Tabelle 4-3, beziehungsweise in Anlage 2, Blatt 2-14 angegeben. Als Eingangsdaten wurden nur die Werte für Wehnsen verwendet, da für Sulingen lediglich an 4 Proben die S-Spezies bestimmt worden sind.

Tabelle 4-3: Korrelationskoeffizienten nach Spearman und Regressionsgleichungen

Parameter	r_S	n	Regressionsgleichung$^+$	MAE	NRMS
TOC$^{(S)}$ - Glühverlust$^{(S)}$	0,79	174	(TOC)[%] = 0,20·(GV)[%] - 0,032[%]	0,06%	0,9%
Sulfid-S$^{(K)}$ – Gesamt-S$^{(K)}$	0,99	58	(S_2-S)[%] = 0,95·(S_{gesamt}) [%]	0,005%	0,1%
Sulfid-S$^{(K)}$ – TOC$^{(S)}$	0,52	58	Korrelation ist zu gering, es wurde keine Gleichung aufgestellt.		

r_S: Korrelationskoeffizient nach Spearman mit dem Signifikanzniveau 0,01 (zweiseitig), MAE: durchschnittlicher absoluter Fehler, NRMS: normalisierte mittlere quadratische Abweichung, $^{(S)}$Spülbohrung, $^{(K)}$ Kernbohrung, $^+$Angabe in [%] bezogen auf Feststoffmasse, d.h. 100% = $1 \cdot 10^6$ mg·kg^{-1}; Ausgangswerte in Anlage 2, Tabellen A2-4 bis A2-6.

Die Regressionsgleichungen in Tabelle 4-3 wurden an den Daten von Thülsfelde aus WALTHER et al. (2002) für Sulfid und TOC und an den Sulfid-Werten aus Sulingen getestet. In Abbildung A2-3 in Anlage 2, Blatt 2-17 sind die gemessenen und berechneten Werte einander gegenübergestellt. Die Fehler von MAE(Sulfid-S) = 0,0015% und MAE(TOC) = 0,04% zeigen, dass die, für Werte an Proben aus Wehnsen angepasste Regressionsgleichung, für Parameter aus Thülsfelde und Sulingen übertragbar ist.

Die Abbildung 4-3 zeigt das Verhältnis von Sulfid-/Gesamtschwefel bezogen auf den Gesamtschwefel für alle drei Untersuchungsgebiete. Für das Gebiet Thülsfelde wurden die Daten aus WALTHER et al. (2002) herangezogen. Diese Abbildung verdeutlicht, dass meist mehr als 80% des Gesamtschwefels als Sulfidschwefel vorliegen.

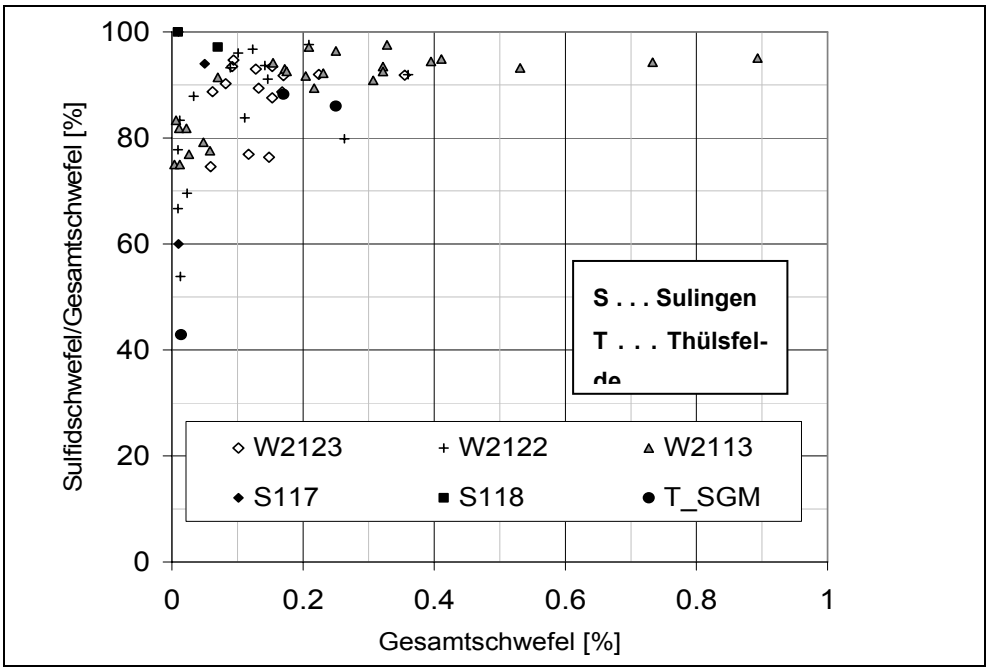


Abbildung 4-3: Sulfid-Schwefel/Gesamtschwefel

Der Gehalt an TOC, ermittelt an Proben aus der Spülbohrung korreliert mit dem Gehalt an Gesamtschwefel der Spülbohrung mit r_S = 0,64 und mit dem Gesamt- und Sulfidschwefelgehalt der Kernbohrung mit r_S = 0,52, jeweils mit dem Signifikanzniveau 0,01, siehe Tabelle A2-11 in Anlage 2, Blatt 2-14.

4.1.3.4 Vergleich der Ergebnisse von Spül- und Kernbohrungen

Beim Bau von Messstellen im Einzugsgebiet von Wasserfassungen werden meist Spülbohrungen niedergebracht, da diese deutlich preisgünstiger sind als Kernbohrungen. Bei der Spülbohrung wird der ursprüngliche Gesteinsverband durch das Bohrwerkzeug gestört und mit dem Spülstrom zutage gefördert. Dadurch ist eine teufentreue Probenahme nicht immer gewährleistet. Das Bohrgut-Spülgemisch wird zum Absetzen in eine Rinne geleitet, aus der die Probe entnommen wird. Im Spülstrom und der Rinne tritt entsprechend der unterschiedlichen Korngrößen des Sedimentes eine Fraktionierung auf, wodurch grobes Korn früher sedimentiert als Feinkorn. Aufgrund der anstehenden geologischen Schichten, bestehend aus Mergel, Sanden und Kiesen kann die Bohrlochwand mit Klarwasserspülung nicht stabil gehalten werden. Zur Stabilisierung der Bohrlochwand werden Spülmittelzusätze wie Quelltone (Bentonite) oder Zelluloseprodukte (Antisole) verwendet. Diese Spülmittelzusätze beeinflussen zwangsläufig die Sedimentprobe. Im Einzugsgebiet des Wasserwerkes Wehnsen wurden drei Spülbohrungen mit dem Spülmittelzusatz TIXOTON® niedergebracht. Ausgewählte Parameter des Quelltons TIXOTON® sind in Tabelle 4-4 zusammengefasst.

Tabelle 4-4: Parameter des Spülmittelzusatzes TIXOTON®

Gehalte im TIXOTON®:	
Wassergehalt (Angabe des Vertreibers):	7 – 9%
Glühverlust:	6,5 – 6,7%
Carbonatgehalt:	1,16%
Gesamtschwefel:	0,011 – 0,014%
Gesamtkohlenstoff:	1,02 – 1,09%

Ein weiterer Nachteil der Spülbohrung ist der Nachfall von Sediment im Bohrloch, BIESKE (1998), der zu verfälschten Mischproben führen kann. Hingegen enthalten Bohrkerne ungestörte, teufentreue Gesteinsproben. In Bereichen von Grobkies und Steinen kann teilweise Kernverlust auftreten, da beim Eindringen des Bohrgestänges große Steine beiseite gedrückt werden.

Für den Standort Sulingen wurden ausschließlich gewonnene Bohrkerne untersucht. Im Gebiet Wehnsen wurden aus ausgewählten Teufen Bohrkerne an den gleichen Standorten entnommen, an denen Spülbohrungen abgeteuft wurden, siehe Kapitel 1.3. Bei den Kernbohrungen trat in Bereichen von Grobkies und Steinen teilweise ein erheblicher Kernverlust auf. Dennoch enthielten viele Bohrkerne Steine, die mit den Spülbohrungen überhaupt nicht gewonnen werden konnten. Bei einem Vergleich von Parametern aus Spül- und Kernbohrung ist zu berücksichtigen, dass Abweichungen durch kleinräumige Heterogenität hervorgerufen werden können.

Die Abbildung 4-4 zeigt den Feinkornanteil und den K-Wert jeweils am Bohrgut von Spül- und Kernbohrung. Für die meisten Proben aus den Spülbohrungen wurden deutlich geringere Feinkornanteile bestimmt, als für die Kernproben. Deshalb wurde für die Proben aus den Spülbohrungen ein höherer K-Wert berechnet, als für die Proben aus der Kernbohrung. In

Abbildung 4-5 ist der Glühverlust, als Indikator organischen Kohlenstoffs und der Gehalt an Schwefel, jeweils bestimmt an Sedimentproben aus Spül- und Kernbohrung, dargestellt. An den gestörten Proben aus den Spülbohrungen wurden deutlich niedrigere Gehalte an Gesamtschwefel und geringere Werte für den Glühverlust ermittelt, als für die ungestörten Bohrkerne.

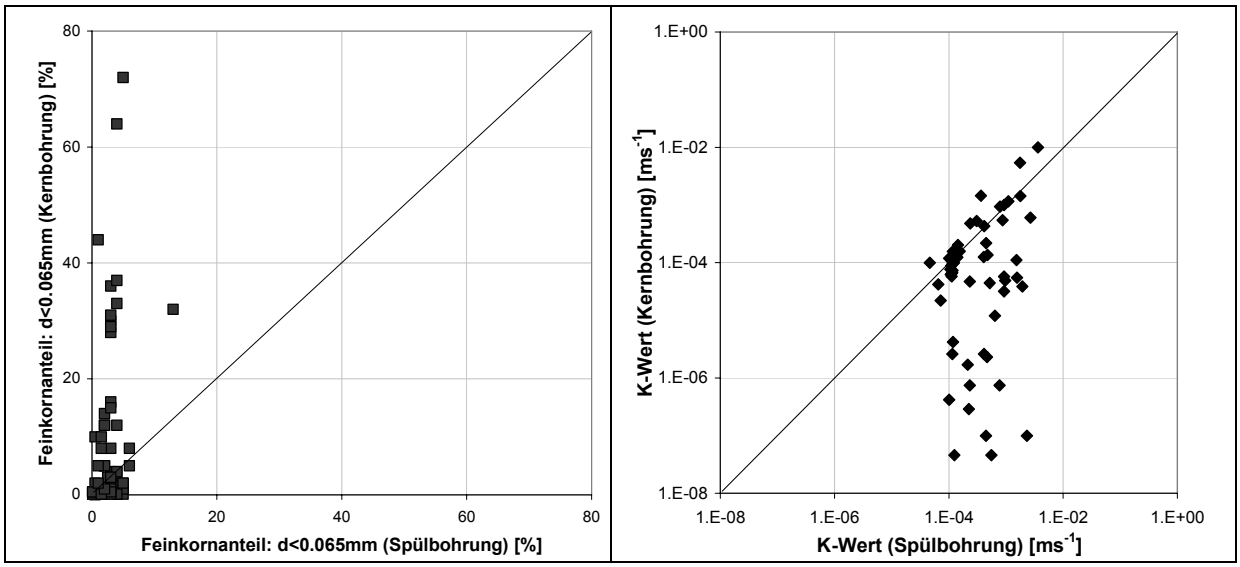


Abbildung 4-4: Vergleich von Feinkornanteil (links) und K-Wert (rechts), bestimmt an Proben aus Spül- und Kernbohrungen

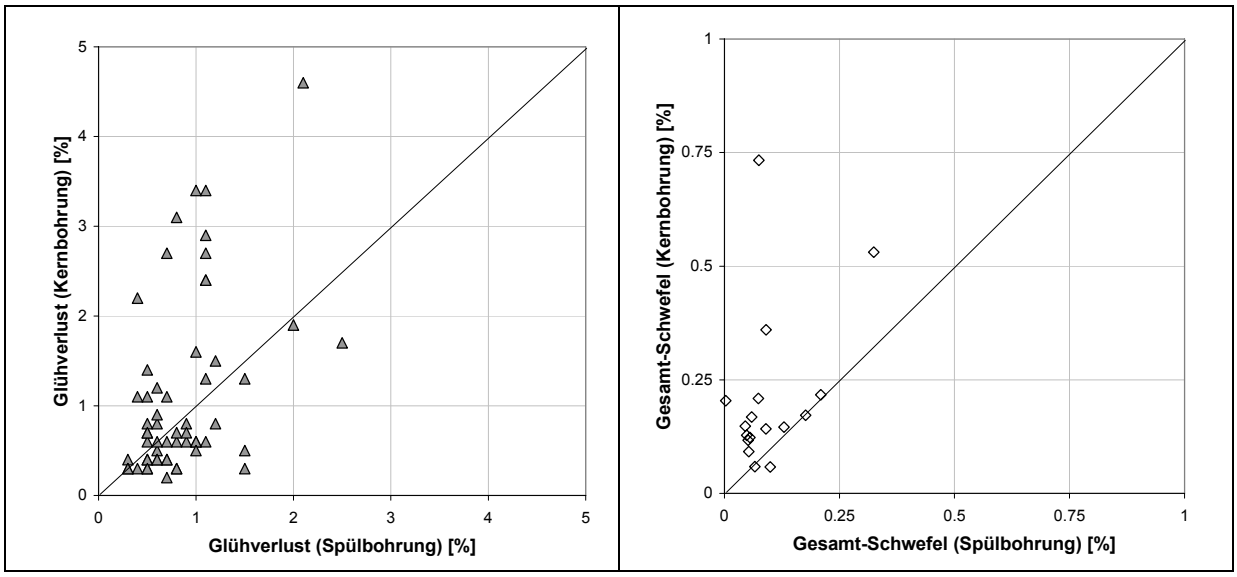


Abbildung 4-5:Vergleich von Glühverlust (links) und Gesamtschwefel (rechts), bestimmt an Proben aus Spül- und Kernbohrungen

4.1.3.5 Charakterisierung des organischen Kohlenstoffs

Die Ergebnisse der Analysen „löslicher organischer Kohlenstoff“ (DOC_l), „labiler Kohlenstoff“ (C_l oder auch $KMnO_4$-Verbrauch) und „heißwasserlöslicher Kohlenstoff“ (C_{HWL}) nach Anlage 2, Blatt 2-1f, an Proben der Spülbohrung sind in Tabelle A2-3 (a-c), Anlage 2, Blatt 2-5 bis Blatt 2-8 aufgeführt. In Tabelle 4-5 sind die mittleren Gehalte, statistische Parameter, und der Anteil jeder C-Fraktion am TOC angegeben.

Die Korrelationen nach Spearman, die in Tabelle A2-11 im Anlage 2, Blatt 2-14 dargestellt sind, zeigen keine signifikanten Zusammenhänge zwischen dem TOC- und dem DOC_I- bzw. C_{HWL}-Gehalt, da $r_S < 0,5$ ist. Zwischen TOC und C_I belegt ein Koeffizient von $r_S = 0,81$ einen engen Zusammenhang.

Tabelle 4-5: Mittlere Gehalte und statistische Parameter der analysierten C-Spezies

Parameter	Mittelwert[2)] [mg·kg^{-1}] C	S [mg·kg^{-1}] C	Maximalwert [mg·kg^{-1}] C	Anteil am TOC[1)] [%]
C_I	401	± 383	1470	30
C_{HWL}	57	± 27	141	4
DOC_I	24	± 15	64	2

[1)]basierend auf dem Mittelwert für TOC, MW(TOC) = 1320 mg·kg^{-1} (0,132 %) nach Tabelle 4-2 [2)]n =58

4.1.4 Diskussion und Bewertung

In den vorangegangenen Abschnitten wurden die Ergebnisse von Gesteinsuntersuchungen, aus Bohrungen in zwei Gebieten Norddeutschlands dargestellt. In diesem Abschnitt werden die Resultate bewertet und diskutiert.

Vertikale Verteilung von Reduktionsmitteln und hydraulische Verfügbarkeit

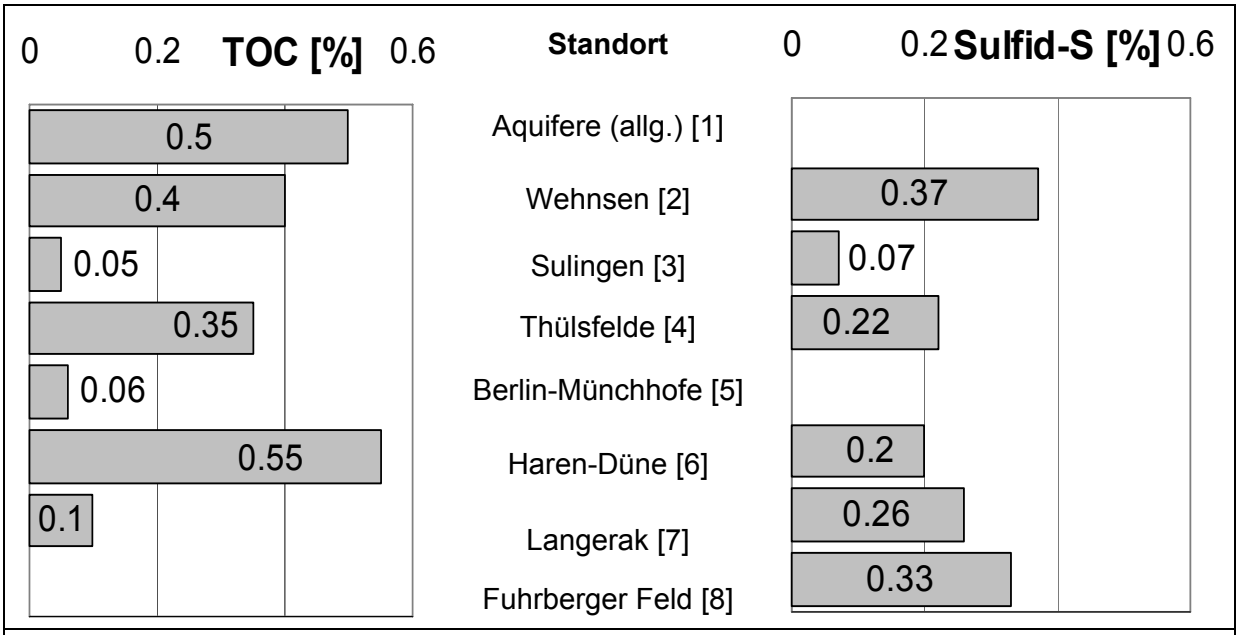
Die dargestellten Vertikalprofile in Abbildung 4-1 und in Anlage 2, Blatt 2-15 und 2-16 zeigen für Wehnsen, dass die maximalen Gehalte von TOC und Sulfid-Schwefel im Bereich bindigen Materials, also Schluff-, Ton- oder Mergelschichten anzutreffen sind. Diese Bereiche sind jedoch vergleichsweise hydraulisch passiv, da sie aufgrund ihrer hydraulischen Leitfähigkeit nur von geringen Wassermengen passiert werden. Deshalb können Umsatzprozesse in diesen Zonen nur einen sehr geringen Einfluss auf die Beschaffenheit des gesamten Grundwassers haben. Auch innerhalb hydraulisch aktiver Zonen können kleinräumige hydraulisch isolierte Bereiche, beispielsweise in Form dünner Tonlinsen auftreten. Diese werden mit der hier praktizierten Analyse von Mischproben nicht exakt erfasst. Somit können Fehler auftreten, wenn in kleinen, hydraulisch isolierten Bereichen ein hoher Reduktionsmittelgehalt vorliegt und diese Probe infolge der Mischung als hydraulisch aktiv eingestuft wird. Um derartige Fehler zu quantifizieren ist eine hoch aufgelöste Untersuchung am Bohrkern notwendig, die wiederum nicht Inhalt der vorliegenden Arbeit gewesen ist.

Betrachtet man lediglich Kernproben aus Wehnsen mit $K \geq 10^{-6}$ m·s^{-1}, also die hydraulisch aktiven Bereiche des Hauptgrundwasserleiters, sind darin durchschnittlich 1053 mg·kg^{-1} Sulfid-S und in teufentreuen Proben der Spülbohrung etwa 1336 mg·kg^{-1} TOC enthalten. Diese Werte sind deutlich höher, als für Bohrungen im Gebiet Sulingen mit durchschnittlich etwa 200 mg·kg^{-1} TOC beziehungsweise 330 mg·kg^{-1} Sulfid-S.

In Abbildung 4-6 sind die maximalen Gehalte der Reduktionsmittel TOC und Sulfid-S hydraulisch aktiver Bereiche unterschiedlicher Standorte gegenübergestellt. Bei der Auswahl wurden hier lediglich Bohrungen berücksichtigt, die mehr als 20 m u GOK tief sind. Für Wehnsen liegen die Werte von Sulfid-S, verglichen mit anderen Grundwasserleitern, HARTOG (2003), WALTHER (2002), HOUBEN (2000) im mittleren bis oberen Bereich. Gleiches gilt für die Gehalte von TOC, verglichen mit RÖßNER (1996) und HARTOG (2003). Für den Grundwasserleiter Fuhrberger Feld werden ebenfalls >1.000 mg·kg^{-1} TOC angegeben,

STREBEL et al. (1992). Die in MEHRANFAR (2003) genannten Werte gelten für Böden bis max. 4 m Tiefe und liegen für Sande im Bereich von 1000 bis 2000 $mg \cdot kg^{-1}$ (TOC) und von 0,2 bis 120 $mg \cdot kg^{-1}$ (Sulfid). Für Grundwassersedimente gibt BORCHERS (1993) mittlere TOC-Gehalte von 200 bis 500 $mg \cdot kg^{-1}$ und Sulfid-S von > 370 $mg \cdot kg^{-1}$ an.

Die Gehalte an Reduktionsmitteln im untersuchten Bereich des Grundwasserleiters Sulingen sind demzufolge vergleichsweise gering. In beiden Grundwasserleitern, Wehnsen und Sulingen, ist aufgrund der vorhandenen Reduktionsmittel sowohl eine chemo-lithotrophe, als auch eine chemo-organotrophe Denitrifikation potentiell möglich. Mit den Informationen zur Wasserbeschaffenheit, siehe Abbildung 4-1 und in Anlage 2, Blatt 2-15 und 2-16, können niedrige Gehalte an TOC bzw. Sulfid im oberen Bereich des Aquifers durch bereits erfolgte Oxidation mit gelöstem Sauerstoff oder Nitrat, beispielsweise im oberen Grundwasserleiter (bis 20m u GOK) am Standort W2113, erklärt werden.



[%] bezogen auf die Trockenmasse (TS) der Sedimentprobe
[1] Lockergesteinsaquifere, in HARTOG (2003), [2] bis 60m u GOK, [3] bis 35m u GOK]
[4] bis 40m u GOK, aus WALTHER et al. (2002), [5] bis 42m u GOK, RÖßNER (1996),
[6] bis 60m u GOK, aus HOUBEN (2000), [7] bis 40m u GOK, aus HARTOG (2003)
[8] im reduzierten Aquifer, aus SPRINGOB et al. (1999)

Abbildung 4-6: Maximale Gehalte an TOC und Sulfid-Schwefel verschiedener Aquifere

Ausweisung von Indikatorparametern für die Gehalte an Reduktionsmitteln

Am Großteil der untersuchten Bohrkerne aus Wehnsen liegen meist mehr als 80% des Gesamtschwefels als Sulfidschwefel vor, siehe Abbildung 4-3. Nach Untersuchungen von HOUBEN (2000) im Emsland stellt 95% des Gesamtschwefels der Sulfidschwefel dar. Teilweise wurde ein deutlich geringerer Anteil an Sulfidschwefel für geringe Gehalte an Gesamtschwefel, etwa <0,1%(S), bestimmt. Ursache dafür kann ein Verbrauch des Sulfidschwefels durch die Oxidation mit gelöstem Sauerstoff oder Nitrat sein.

Die Gehalte des TOC und des Sulfid-Schwefels wurden mit der Berechnung von Korrelationskoeffizienten auf die Intensität ihres Zusammenhangs zum Parameter Glühverlust bzw. Gesamtschwefel geprüft. An den Datensätzen für das Gebiet Wehnsen ist ein enger Zu-

sammenhang zwischen Glühverlust und organischem Kohlenstoff mit r_s = 0,79, als auch zwischen Gesamt- und Sulfidschwefel mit r_s = 0,99 festzustellen, siehe Blatt 2-14 in Anlage 2. WALTHER et al. (2002) bestimmten für den Grundwasserleiter Thülsfelde für den Glühverlust und TOC mit einen Koeffizienten von r_s = 0,88 und für Gesamt- und Sulfid-Schwefel mit r_s = 0,99, ähnlich enge Zusammenhänge wie in der vorliegenden Arbeit.

Für die Beziehungen zwischen TOC und Glühverlust, sowie für Gesamt- und Sulfidschwefel wurden lineare Regressionsgleichungen aufgestellt, siehe Tabelle 4-3. Die Güte der Anpassung, ausgedrückt als mittlerer absoluter Fehler (MAE) beträgt für die Berechnung des TOC aus dem Glühverlust 600 $mg \cdot kg^{-1}$. Verglichen mit dem Mittelwert des TOC von 1320 $mg \cdot kg^{-1}$, siehe Tabelle 4-2, ist dieser Fehler recht hoch. Dennoch kann der Glühverlust als Indikatorparameter für den TOC dienen. Für die Beziehung Sulfid- und Gesamtschwefel ist der Fehler, ausgedrückt als MAE = 50 $mg \cdot kg^{-1}$, verglichen mit dem Mittelwert von 1570 $mg \cdot kg^{-1}$ deutlich geringer. Der Gehalt an Gesamtschwefel ist für den Sulfidschwefel ein geeigneter Indikatorparameter, aus dem sich der Sulfidschwefelgehalt mit vergleichsweise geringen Fehlern berechnen lässt. Die, anhand von Daten aus dem Untersuchungsgebiet Wehnsen aufgestellten Regressionsgleichungen, siehe Tabelle 4-3, sind mit geringen Abweichungen auch für die vorliegenden Proben aus dem Gebiet Thülsfelde gültig.

Der Anteil des biologisch verfügbaren Materials kann allein aus den Gehalten an TOC und S-Sulfid nicht abgeleitet werden. Hierfür sind beispielsweise Batchversuche zum Nitratumsatz notwendig. Für einen vollständigen Verbrauch des biologisch verfügbaren Materials, also einer Versuchsdauer bis zum Stillstand der Prozesse sind meist Jahre notwendig, MEHRANFAR (2003). In Kapitel 4.2 werden die Ergebnisse der durchgeführten Versuche dargestellt.

Vergleich der Ergebnisse aus Spül- und Kernbohrung

Die Abbildung 4-4 zeigt den Feinkornanteil und den K-Wert jeweils am Bohrgut von Spül- und Kernbohrung. Am Spülbohrgut wird der Feinkornanteil unterschätzt. Auch der Glühverlust, als Indikator organischen Kohlenstoffs und der Gehalt an Gesamt-Schwefel werden bei der Spülbohrung unterschätzt, siehe Abbildung 4-5. Ursache dafür ist eine Kornfraktionierung bei der Spülbohrung, wobei bindige Sedimentanteile mit hohen Gehalten an Reduktionsmitteln in der Spülung suspendieren und somit bei der Probenahme nicht mit erfasst werden. Der Feinkornanteil in der Probe wird beim Einsatz des Spülmittelzusatzes TIXOTON® nicht erhöht. Für hydraulisch aktive Bereiche ($K \geq 10^{-6} m \cdot s^{-1}$) des untersuchten pleistozänen Grundwasserleiters liefern die Proben aus der Spülbohrung repräsentative Ergebnisse. Da für hydraulisch passivere Bereiche ($K < 10^{-6} m \cdot s^{-1}$) der Feinkronanteil nicht vollständig erfasst wird, wird die hydraulischen Leitfähigkeit überschätzt. Schichten mit bindigem Material werden bei der Spülbohrung nur eingeschränkt wiedergegeben. Deshalb sollten beim Einsatz von Spülbohrungen zur Ausweisung bindiger Bereiche zusätzlich geophysikalische Untersuchungen, beispielsweise Gamma-Ray oder FEL-Log durchgeführt werden. Werden die beschrieben Untersuchungen an gestörten Proben aus einer Spülbohrung durchgeführt, so können Bentonite als Spülmittelzusatz eingesetzt werden, da dadurch der Feinkornanteil der entnommenen Sedimentproben nicht erhöht wird.

Für die wasserwirtschaftliche Praxis ergeben sich für hydraulisch vergleichbare Grundwasserleiter folgende Schlussfolgerungen: Grundsätzlich ist die Gewinnung von Sedimentproben durch Kernbohrungen der Spülbohrung vorzuziehen. Sind zur Bestimmung hydrauli-

scher Parameter und der Gehalte an Reduktionsmitteln für den Stickstoffumsatz im Lockergestein beispielsweise lediglich Spülbohrungen einsetzbar, so können mit den hier dargestellten Methoden in begrenztem Rahmen für vergleichbare Grundwasserleiter Aussagen hinsichtlich der hydraulischen Leitfähigkeit und der Gehalte an Reduktionsmitteln getroffen werden.

Charakterisierung des organischen Kohlenstoffs

Im Mittel beträgt der labile Kohlenstoff $C_l \approx 30\%$, der $C_{HWL} \approx 5\%$ und der $DOC_l \approx 2\%$ des TOC-Gehaltes, siehe Tabelle 4-5. Daran wird deutlich, dass vermutlich etwa 30% des gesamten organischen Kohlenstoffs biologisch verfügbar sind und für die Denitrifikation zur Verfügung stehen. Folgende maximalen Werte wurden an Sedimentproben aus Wehnsen ermittelt: C_l = 1.400 mg·kg^{-1}, der C_{HWL} = 140 mg·kg^{-1} und der DOC_l = 53 mg·kg^{-1}. Für Böden gibt MEHRANFAR (2003) mit C_{HWL} = 2.900 mg·kg^{-1} deutlich höhere und mit DOC = 40 mg·kg^{-1}. damit vergleichbare Maximalwerte an.

4.2 Batchversuche zum Nitratumsatz

4.2.1 Ziele

Es wurden statische Batchversuche am Material ausgewählter ungestörter Kernproben aus Wehnsen (23) und Sulingen (4) durchgeführt. **Ziele** dieser Versuche waren:

- Die Größenordnung und Art der Prozesse zu bestimmen:

  Es wurde die Hypothese aufgestellt, dass für die Gebiete Wehnsen und Sulingen die Denitrifikation der dominierende Eliminationsprozess des Nitrates ist, was für zahlreiche norddeutsche Grundwasserleitern nachgewiesen worden ist, PÄTSCH (2006), KÖLLE (2001). Aus der Differenz des eliminierten Nitrates und der entstandenen N-Reaktionsprodukte ($N_{2(Deni)}$, N_2O und NO_2^-) kann der Anteil der nicht-denitrifikativen Nitratelimination bestimmt werden. Nach Kapitel 2 ist unter anderem eine Elimination gelösten Nitrates durch Sorption oder Dissimilatorische Nitratreduktion zu Ammonium (DNRA) möglich. Das Sediment von ausgewählten Versuchen mit einer hohen Differenz von Elimination und Denitrifikation wurde auf den Gehalt von eluierbarem und fest-sorbierten Nitrat untersucht. Als Indikator einer DNRA wurde der Gehalt an NH_4^+ gemessen.

  Anhand der vorhandenen Reduktionsmittel, Sulfid bzw. organischer Kohlenstoff und der Reaktionsprodukte SO_4^{2-}, CO_2, Fe_{gesamt}, Mn_{gesamt}, und HCO_3^- in Abhängigkeit vom pH-Wert, soll geschlossen werden, welche Art der Denitrifikation (chemo-organotroph oder –lithotroph) vorherrscht. Neben $N_{2(Deni)}$ wurden an vielen Versuchen vergleichsweise hohe Konzentrationen von den Zwischenprodukten der Denitrifikation, Lachgas und Nitrit, gemessen. Es sollte versucht werden, die Abhängigkeit der Lachgas- und Nitritbildung zu bestimmen.

- Die Kinetik des Nitratumsatzes zu beschreiben:

  Für unterschiedliche Bohrteufen und Bohrstandorte sollte die Kinetik des Nitratumsatzes mit Kennwerten (λ) quantifiziert werden, um die Größenordnung und vertikale Verteilung der Prozesse als Eingangsparameter für numerische Transportmodelle, siehe auch Kapitel 7, zu beschreiben. Es sollte untersucht werden, ob an die vorhandenen Datensätze der Elimination von Nitrat Reaktionskinetiken 0. Ordnung, 1. Ordnung und der Michaelis-Menten-Kinetik beschrieben werden können.

In der Praxis besteht häufig Bedarf, die Größenordnung der potentiellen Denitrifikation kurzfristig abzuschätzen. Es liegt auf der Hand, dass die hier beschriebenen Versuche mit einer Dauer von mehreren Monaten bzw. Jahren dafür nicht geeignet sind. Es wurde untersucht, ob zwischen kurzfristiger und langfristiger Denitrifikation ein Zusammenhang besteht. Das Ziel dabei war, aus der initialen Denitrifikation, bzw. Elimination innerhalb einer Zeitdauer von wenigen Tagen, auf die langfristige Denitrifikation (Elimination) über Regressionsgleichungen zu schließen. Unter initialer Denitrifikation wird die Denitrifikation zu Versuchsbeginn, hier innerhalb weniger Tage, verstanden. Im Zusammenhang mit der Kinetik des Nitratumsatzes sollten ebenfalls Aussagen über die notwendige Mindest-Versuchsdauer getroffen werden. Weiterhin wurde geprüft, ob auf die Größe der Nitratelimination beziehungsweise Denitrifikation innerhalb einer bestimmten Versuchsdauer aus dem Reduktionsmittelgehalt geschlossen werden kann.

- Den biochemisch verfügbaren Anteil der Reduktionsmittel zu bestimmen:

  Wenn im Versuch kein Nitrat mehr eliminiert wird, sind die Prozesse zum Stillstand gekommen. Der verbliebene Gehalt an Sulfid und organischen Kohlenstoff im Sediment zu diesem Zeitpunkt gibt die Menge nicht-bioverfügbarer Reduktionsmittel an. Aus dem bioverfügbaren Anteil an Reduktionsmitteln kann auf das Nitratumsatz-Vermögen des Grundwasserleiters geschlossen werden. In der vorliegenden Arbeit wurden Daten von Versuchen mit einer Laufzeit von bis zu 570 d ausgewertet. Allerdings waren nach dieser Dauer die Prozesse an vielen Versuchen noch nicht zum Stillstand gekommen.

- Für die Denitrifikation an den durchgeführten Feldmessungen Vergleichswerte zu schaffen:

  Im Kapitel 5 werden Ergebnisse von Untersuchungen zur Denitrifikation im Feld dargestellt. Es handelt sich dabei vorrangig um Gasmessungen und Tracerversuche an bestehenden Vorfeldmessstellen. Da Kerne aus der Teufe der Filterstrecken von 5 Messstellen gewonnen und untersucht worden sind, an denen ebenfalls Tracerversuche im Gelände durchgeführt wurden, ist ein direkter Vergleich von Feld- und Labormessungen der Denitrifikation möglich. Dieser wird im Kapitel 5.2 durchgeführt.

In diesem Kapitel wird anfangs der Aufbau und Ablauf der Versuche beschrieben. Mögliche Verfahren zur Auswertung der Messergebnisse werden dargestellt und angewendet. Eine Bewertung und Diskussion der Ergebnisse wird am Ende des Abschnittes vorgenommen. Die Messwerte der Versuche sind im Anlage 2, ab Blatt 2-20 aufgeführt.

4.2.2 Methoden und Vorgehensweise

4.2.2.1 Aufbau der Batchversuche

Für jede Probe wurden drei Parallelversuche angesetzt. Dabei wurde feuchtes Sediment mit 200 ml Grundwasser, welches mit 150 $mg \cdot l^{-1}$ Nitrat als $K^{15}NO_3^-$ (60 atom%) versetzt war, unter N_2-Atmosphäre in einer Glove-Box in 550 ml-Flaschen gefüllt, siehe Abbildung 4-7. Die Flaschen waren zuvor mit N_2 gespült worden. Die Flaschen wurden anschließend mit 2 Septen (doppelt) verschlossen. Die Begasung des Wassers (Testlösung) und das Arbeiten unter N_2-Atmosphäre sollte ein sauerstofffreies Milieu gewährleisten. Die verwendeten Lösungen werden folgendermaßen definiert:

Ausgangslösung: Grundwasser, das für die Versuche verwendet wird, Konzentration (β_A)

Testlösung: Ausgangslösung + Nitrat als $K^{15}NO_3$, mit N_2 gespült (begast), vor Versuchsbeginn, Konzentration (β_T = 150 mg·l^{-1} $^{15}NO_3^-$)

Porenwasser: Wasser, welches sich nach Probenahme im Porenraum der Sedimentprobe befindet, Konzentration (β_H)

Versuchslösung: Lösung im Batchgefäß nach Versuchsbeginn, deren Konzentration β_V durch die Testlösung β_T, die Konzentration im Porenwasser β_H und Umsatzprozesse im gasdicht verschlossenen Gefäß bestimmt wird.

Die Trockenmasse des Sedimentes betrug im Mittel M = 0,254 kg (s = ±0,017 kg) und die gesamte Wassermenge im Batchgefäß nach Zugabe der 200 ml Testlösung von etwa M = 0,237 kg. Das Massen-Feststoff-Flüssigkeitsverhältnis beträgt damit etwa 1 : 1. Im Grundwasserleiter beträgt es für ein Gesamtporenraumvolumen von 25 % etwa 1 : 8. Der Nitratgehalt entspricht im Mittel etwa β_o = 26,8 mg·kg^{-1} N (s = ± 1,9 mg·kg^{-1} N). Übertragen ins Feld entspräche dies etwa 950 mg·l^{-1} NO_3^{-1}. Die Nitratzuführung ist im Batchversuch damit deutlich höher, als im tiefen Grundwasserleiter bei einem flächigen Eintrag von 150 bis 200 mg·l^{-1} zu erwarten ist. Die Wahl dieser hohen Konzentration der Versuchslösung erwies sich jedoch als notwendig, da bei einigen Versuchen selbst diese hohe Nitratmenge innerhalb weniger Wochen vollständig verbraucht war und ein Wiederbefüllen nicht immer lückenlos möglich war. Der verbleibende Gasraum, etwa 250 ml, wurde mit N_2 gefüllt um ein O_2 armes, respektive O_2 freies Milieu zu schaffen. Die Versuchsflaschen werden bei 10°C im Dunkeln mit dem Septum nach unten gelagert und wöchentlich einmal per Hand geschüttelt.

Bezeichnung	Beprobung
Gasraum (headspace) mit N_2 gefüllt	$^{15}N_2$, N_2O, CO_2 (aus $^{15}N_2$ wird $N_{2(Deni)}$ berechnet)
Versuchslösung	NO_3^-, SO_4^-, NO_2^- (HCO_3^-, $Fe_{ges.}$, $Mn_{ges.}$, NH_4^+)[1]
Sediment	(TOC, S-Spezies, Glühverlust)[1] (eluierbares und sorbiertes $^{15}NO_3^-$)[2]

[1]Analyse nur zu Beginn und am Ende des Versuches, [2] nach 184 d Versuchsdauer ausgewählter Proben

Abbildung 4-7: Statische Batchversuche zum Nitratumsatz

War das zugegebene Nitrat vollständig verbraucht, so wurde durch Zugabe hochkonzentrierter Testlösung die Nitratmenge wieder auf das Niveau des Versuchsbeginns (β = 150 mg·l^{-1} NO_3^-) angehoben. Nicht immer konnte die Nitratzugabe rechtzeitig erfolgen. An einigen Versuchen wurde Nitrat kurzzeitig zum limitierenden Faktor der Denitrifikation. Die Zeitverläufe von Nitrat, Sulfat und der N-Reaktionsprodukte zeigen für diese Fälle „Plateaus“ von nahezu konstanter Stoffmenge bis zur Injektion von Nitrat. An den Versuchen W20 und W21, siehe

Abbildung 4-10, sind diese Plateaus innerhalb der Versuchsdauer von 100 d an der Nitratelimination sehr gut zu erkennen.

4.2.2.2 Probenahme und Analyse

In verschiedenen Zeitabständen, nach 2 d, 7 d, 84 d, 184 d, 275 d, 365 d und 570 d wurden aus der Versuchslösung Proben entnommen und die Konzentration von Nitrat, Sulfat und Nitrit analysiert, siehe Anlage 2, Blatt 2-20 bis 2-30. Aus dem Gasraum wurden ebenfalls Proben entnommen und die Konzentrationen von N_2O, $^{15}N_2$ und CO_2 bestimmt. Aus der Konzentration des $^{15}N_2$ wird der durch Denitrifikation gebildete Stickstoff ermittelt, WELL & MYROLD (1999). Dieser wird im Folgenden als $N_{2(Deni)}$ bezeichnet. Das entnommene Wasser- bzw. Gasvolumen wurde jeweils mit Testlösung und N_2 wieder aufgefüllt. Die dadurch entstandene Konzentrationsänderung wurde über Mischungsrechnungen korrigiert, siehe Anlage 2, ab Blatt 2-18 und WALTHER et al. (2005).

Zur Identifizierung der Art der ablaufenden Denitrifikation und der Änderung der Wassergüte wurden ausgewählte Kationen, Fe_{gesamt}, Mn_{gesamt}, Al^{3+} sowie die Parameter HCO_3^-, O_2, Eh, elektrische Leitfähigkeit und pH-Wert zu Versuchsbeginn, nach 184d und am Versuchsende, nach 570d, analysiert, siehe Anlage 2 Tabelle A2-19 und A2-20. Am Versuchsende wurde das Sediment ausgewählter Versuche auf den Gehalt an Reduktionsmitteln untersucht.

Zur Quantifizierung einer möglichen Nitratsorption wurden nach einer Versuchsdauer von 184d (6 Monaten) jeweils einer der drei Parallelansätze abgebrochen und die Sedimentprobe auf sorbiertes Nitrat untersucht. Es wird dabei zwischen (a) reversibler Sorption, bestimmbar durch Elution mit $CaCl_2$, im Folgenden auch eluierbares Nitrat genannt und (b) irreversibler Sorption, bestimmbar durch $^{15}NO_3^-$ -Analyse des Sedimentes, unterschieden. Die irreversible Sorption ergibt sich aus (^{15}N in Gesamt N) – (^{15}N in NO_3^-), wobei ^{15}N in Gesamt N durch Verbrennung der Festproben erfolgt. Die Sedimentproben wurden eluiert und die dadurch gewonnene N-Nitratmenge als reversibel gebundenes Nitrat berechnet. Die $^{15}NO_3^-$ - Messungen am Sediment wurden am Kompetenzzentrum Stabile Isotope, Forschungszentrum Waldökosysteme der Universität Göttingen, wie in HART & MYROLD (1996) beschrieben, durchgeführt. Die sorbierten Nitratanteile wurden für ausgewählte Sedimentproben den jeweiligen Kornfraktionen zugeordnet, um einen möglichen Zusammenhang zwischen Nitratsorption und Kornfraktion feststellen zu können.

Da bei Ablauf der DNRA Ammonium entsteht, siehe Kapitel 2, wurde die Versuchslösung nach 184 d auf den Gehalt an NH_4^+ analysiert.

Die Gas- und Isotopenanalysen, sowie der Gehalt von $^{15}NO_3^-$ am Sediment, wurden vom Department für Nutzpflanzwissenschaften, Abt. Agrarpedologie und dem Kompetenzzentrum Stabile Isotope, Foschungszentrum Waldökosystem, beide Universität Göttingen, durchgeführt. Die Analyse der Anionen und Kationen erfolgte im Labor des Institutes für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden und ist in Anlage 2, Blatt 2-18 beschrieben.

4.2.2.3 Aufbereitung und Darstellung der gemessenen Daten

Zur Interpretation der Messwerte war eine Systematisierung und Aufbereitung der gemessenen Daten notwendig, deren Methodik im Folgenden kurz erläutert wird. Die gemessenen Konzentrationen werden als Masse, beispielsweise Masse des NO_3^--N, auf die im Versuch verwendete trockene Feststoffmasse bezogen und somit in [$mg \cdot kg^{-1}$] bzw. [$\mu g \cdot kg^{-1}$] angegeben.

Identifikation der Art der Prozesse und deren Quantifizierung

Es wird zwischen den Prozessen Nitrat-Elimination (E), Denitrifikation (D) und nicht-denitrifikativen Prozessen (X) unterschieden. Als initiale Denitrifikation D_i bzw. Elimination E_i wird hier der Ablauf dieser Prozesse innerhalb der ersten Tage bis Wochen nach Ansatz der Versuche bezeichnet. Es wird definiert, dass Prozesse, die die Nitratkonzentration mindern, durch negative Werte ausgedrückt werden, siehe Abbildung 4-8. Die Art der ablaufenden Prozesse wird beispielsweise anhand von Darstellungen des zeitlichen Verlaufes von E(t) und D(t) oder durch zeitabhängige Raten erfasst.

Elimination E:

Als Elimination wird ein Rückgang der Konzentration des Nitrates bezeichnet. Die zeitabhängige Elimination E(t) von Nitrat aus einer Lösung ist definiert als:

$$E(t) = \beta(t) - \beta(t_0), \qquad (4-2)$$

mit: $\beta(t_0)$ = Konzentration zu Versuchsbeginn, $\beta(t)$ = Konzentration zum Zeitpunkt t.

Findet eine Elimination von Nitrat statt, so ist anhand dieser Definition $E < 0$. Die Elimination umfasst somit denitrifikative, als auch nicht-denitrifikative Prozesse.

Denitrifikation D:

Die Denitrifikation D ist gekennzeichnet durch die Bildung von N_2, N_2O oder auch NO_2^-. Zu Versuchsbeginn sind diese N-Spezies in der Testlösung nicht vorhanden. Die zeitabhängige Denitrifikation D(t) wird hier definiert als Summe der infolge des Denitrifikationsprozesses gebildeten Abbauprodukte von Nitrat, Nitrit (NO_2^-), Lachgas (N_2O) und molekularem Stickstoff ($N_{2(Deni)}$) zum Zeitpunkt t:

$$D(t) = \beta_{NO2}(t) + \beta_{N2O}(t) + \beta_{N2(Deni)}(t), \qquad (4-3)$$

Wobei gilt: $D(t) = D_l(t) + D_h(t)$, (4 – 3a)

Mit: D_l … chemo-lithotrophe Denitrifikation, D_h … chemo-organotrophe Denitrifikation

Die Art der Denitrifikation kann über die Identifizierung der beteiligten Mikroorganismen erfolgen, SCHLEGEL (1992), ZUMFT (1997). An den Laborversuchen wurden derartige Analysen nicht durchgeführt. Deshalb werden im Folgenden Analysen der Wasser- und Sedimentbeschaffenheit ausgewertet, die jedoch nur einen indirekten Nachweis über die Art der Denitrifikation liefern können.

Die Indizien zur Identifizierung der Art der Denitrifikation in einem O_2 freien System werden hier wie folgt zusammengefasst, siehe auch Kapitel 2:

(a) chemo-lithotrophe Denitrifikation: Anstieg der Konzentration von Sulfat, Absinken von CO_2, HCO_3^- bzw. der Wasserhärte

(b) chemo-organotrophe Denitrifikation: Anstieg von CO_2, HCO_3^- (pH > 4,2) bzw. der Wasserhärte

Dient Pyrit (FeS_2) als Reduktionsmittel und ist Nitrat das einzige Oxidationsmittel, kann anhand der Sulfatproduktion S über die Stöchiometrie der chemo-lithotrophen Denitrifikation die durch diesen Prozess umgesetzte Nitratmenge bestimmt werden:

$$S(t) = (\beta_{SO4}(t) - \beta_{SO4}(t_0)) \qquad (4-4)$$

$D_l(t) = S(t) \cdot f_{ST}$, (4 – 4a)

sauerstofffreies System $D_l(t) = (\beta_{SO4}(t) - \beta_{SO4}(t_0)) \cdot f_{ST}$ (4 – 4b)

mit: $\beta_{So4}(t)$…Sulfatkonzentration zum Zeitpunkt t,

S(t)…Sulfatproduktion [$\mu g \cdot kg^{-1} SO_4^{2-}$],

f_{ST}… Stöchiometriefaktor für die chemo-lithotrophe Denitrifikation nach den Gleichungen (2 – 8) und (2 – 10), siehe Kapitel 2:

nur Teilschritt 1 (Gleichung 2 – 8): $f_{ST(a)} = 0{,}205$

Dabei wird durch die Bildung von 1g Sulfat die äquivalente Masse von 0,205g Nitrat-N umgesetzt.

Teilschritte 1 & 2 (Gleichung (2 – 10): $f_{ST(b)} = 0{,}219$

Dabei wird durch die Bildung von 1g Sulfat die äquivalente Masse von 0,219g Nitrat-N umgesetzt.

Findet eine chemo-lithotrophe Denitrifikation statt und die Konzentration des entstandenen gelösten Fe^{2+} wird nicht spürbar erhöht, so kann dieses:

- Mit Nitrat weiter zu Eisenoxidhydroxid (FeOOH) oxidiert werden, welches ausfällt:

  $NO_3^- + 5Fe^{2+} + 7H_2O \rightarrow ½ N_2 + 5FeOOH + 9H^+$, (4 – 5)

  (2. Teil der chemo-lithotrophen Denitrifikation)

- Durch Carbonat als Siderit ($FeCO_3$) ausgefällt werden, KÖLLE (2001):

  $Fe^{2+} + HCO_3^+ \rightarrow FeCO_3 + H^+$ oder (4 – 6)

- Als Eisensulfid ausgefällt werden.

Bei beiden ersten Reaktionen werden H^+ - Ionen frei. Die Oxidation von Fe^{2+} kann bei einem Absinken des pH-Wertes gedrosselt werden, da die Stoffwechselaktivität des *Thiobacillus denitrificans* in diesem Fall sinkt. Nach KÖLLE (2001) gibt es derzeit keine einfache Möglichkeit zu entscheiden, welche der beiden Reaktionen stattfindet.

Indizien für die Art der Denitrifikation werden durch eine Gegenüberstellung von Daten der Wasserbeschaffenheit in Relationsdiagrammen, die Darstellung von zeitabhängigen Raten, siehe Gleichung (4 – 10) und durch die Berechnung von Korrelationskoeffizienten (r_s) ermittelt.

Mit Anwendung der Gleichung (4 - 3) werden auch andere Prozesse, siehe Kapitel 2, bei denen ebenfalls Nitrit – meist als Zwischenprodukt - entsteht, der Denitrifikation zugeordnet. Entsteht kein Nitrit, so gilt:

$D(t) = G(t)$ (4 - 7)

Wobei G(t) die Gasproduktion ist, der Summe der Gase $N_{2(Deni)}$ und N_2O berechnet wird. N_2O muss auch beim Ablauf einer Denitrifikation nicht zwangsläufig messbar sein, siehe Kapitel 2.2.4. Die zeitabhängige Gasproduktion wird folgendermaßen definiert:

$G(t) = \beta_{N2O}(t) + \beta_{N2(Deni)}(t)$ (4 – 8)

G(t) wird verwendet um beispielsweise den Anteil der Nitritproduktion von der Denitrifikation D(t) abzugrenzen.

Nicht-denitrifikative Nitratelimination X:

Geht eine Verringerung der Nitrat-Konzentration nicht mit der Bildung von N_2, N_2O oder NO_2^- einher, so wirken neben der Denitrifikation andere Prozesse. Dafür kommen beispielsweise Sorption, aber auch DNRA oder Assimilation von Nitrat in Frage. Diese Prozesse werden wie folgt summarisch identifiziert, beziehungsweise quantifiziert, wobei E(t) definitionsgemäß immer negativ und D(t) immer positiv ist:

$$X(t) = E(t) + D(t), \text{ mit } E(t) < 0 \qquad (4-9)$$

Finden neben der Denitrifikation weitere Nitrateliminierende Prozesse statt, so ist X(t) < 0. Sofern die Elimination ausschließlich durch Denitrifikation erfolgt, also –E(t) = D(t) ist, so ist X(t) = 0.

Zu dieser Differenz können Messungenauigkeiten, das heißt ungewollte Gasverluste insbesondere bei den Probenahmen führen. Diese Gasverluste können nach mündlicher Auskunft von Dr. R. Well 2% bis 5% betragen.

Die Abhängigkeit von X(t) von Parametern der Wasser- und Sedimentbeschaffenheit, sowie der Elimination E wird über die Berechnung des Korrelationskoeffizienten (r_s) quantifiziert. Wie oben erwähnt, wird geprüft, ob Nitratsorption oder DNRA als nicht-denitrifikatve Prozesse ablaufen.

Anhand der Funktionsverläufe von E(t) und D(t) wird zur Systematisierung unterschiedlicher Ergebnisse, sprich Konzentrationsverläufe, eine phänomenologische Typisierung vorgenommen. Für einen Vergleich der Elimination und Produktion von Stoffen, beispielsweise zur Quantifizierung des nicht-denitrifikativen Anteils der Nitratelimination kann die Darstellung von zeitabhängigen Raten (R) hilfreich sein:

$$R_E(t) = \frac{E(t_{i+1}) - E(t_i)}{t_{i+1} - t_i} = \frac{\Delta E(t)}{\Delta t} \text{ bzw. } R_D(t) = \frac{D(t_{i+1}) - D(t_i)}{t_{i+1} - t_i} = \frac{\Delta D(t)}{\Delta t} \qquad (4-10)$$

mit: $R_E(t)$ . . . Rate der Elimination, ($R_E < 0$) und $R_D(t)$ . . . Rate der Denitrifikation, ($R_D > 0$).

Gleiche absolute Beträge der Raten R_E und R_D würden beispielsweise Zeiträume kennzeichnen, in denen die Nitratelimination vollständig durch Denitrifikation erfolgt. Angegeben wird somit der zeitliche Verlauf der Raten (R) an den Zeitpunkten (t_i) der Probenahmen:

Elimination: $R_E(t_i\text{-}t_{i-1}) = \{E(t_i) - E(t_{i-1})\}/(t_i - t_{i-1})$ in $[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]$ (4 – 10a)

Denitrifikation: $R_D(t_i\text{-}t_{i-1}) = \{D(t_i) - D(t_{i-1})\}/(t_i - t_{i-1})$ in $[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]$ (4 – 10b)

Das heißt, die für den Zeitpunkt t_i angegebene Rate wurde für den Zeitraum (t_i-t_{i-1}) bestimmt. Die Zeitabschnitte Δt zwischen zwei Probenahmepunkten sind unterschiedlich lang. Bei der Bildung von Raten wird bei veränderlichem Divisor Δt das „Merkmal“ oder das „Element“ der „Stichprobe“ und der Schätzwert einer Kenngröße der Verteilung, z. B. der Mittelwert verändert. Signifikanz – Tests sind an solchen „Ratenzeitreihen“ nicht mehr relevant, (scheinbare Signifikanz). Die Anwendung von Raten ist in erster Linie dann sinnvoll, wenn die Zeitschritte der Probenahmen nahezu konstant sind. In der vorliegenden Arbeit werden dennoch Raten berechnet, um die so erhaltenen Werte mit Raten aus der Literatur vergleichen zu können.

Beschreibung der Kinetik des N-Umsatzes

Wie oben bereits erwähnt, soll untersucht werden, ob die vorhandenen Datensätze der Elimination von Nitrat mit kinetischen Modellen beschrieben werden können. Meist werden derartige Modelle für die Festsubstanz, das heißt im vorliegenden Fall für die Reduktionsmittel C_{org} oder Sulfid-Schwefel angepasst. Voraussetzung dafür ist eine zeitabhängige Erfassung der Gehalte an Reduktionsmitteln, die hier nicht realisiert werden konnten. Demzufolge wird der Konzentrationsverlauf des Nitrates verwendet.

Bei den vorliegenden Anpassungen des N-Umsatzes an eine Kinetik 0. und 1. Ordnung, als Sonderformen der Michaelis – Menten Gleichung, siehe unten, wurde die anfangs zugegebene Nitratkonzentration β_o beibehalten und deshalb nur die Werte $\beta(t) > 0$ berücksichtigt. Da einige Versuche nach der Dauer von einem Jahr abgebrochen wurden, wurde die Reaktionskinetik für die Dauer von maximal 365 d bestimmt. Wenn eine Versuchsdauer berücksichtigt werden soll, innerhalb der das Nitrat vollständig aufgebraucht und deshalb nachdosiert wurde, muss β_o berechnet werden, da sonst $\beta(t)$ negative Werte annehmen wird und eine Anpassung an eine Reaktion 1. Ordnung und der MMK nicht möglich ist.

<u>NO_3^- - Umsatz nach einer Reaktion 0. und 1. Ordnung</u>

Es wird jeweils der Verlauf E(t) sämtlicher Versuche getestet. Die jeweiligen Gleichungen lauten:

Reaktion 0.Ordnung: $$\beta(t) = \beta_o - \lambda_o \cdot t \qquad (4-11)$$

Reaktion 1.Ordnung: $$\beta(t) = \beta_o \cdot e^{-\lambda_1 t} \qquad (4-12)$$

Dabei sind:
- β_o … die Ausgangskonzentration des Nitrates [mg•kg^{-1}]
- β … die zeitabhängige Konzentration des Nitrates [mg•kg^{-1}]
- t … die Versuchsdauer [d]
- λ_o … die Umsatzkennwerte 0.Ordnung [mg•kg^{-1}•d^{-1}]
- λ_1 … die Umsatzkennwerte 1.Ordnung [d^{-1}]

Für die Reaktionskennwerte λ_o und λ_1 werden für jeden Batchversuch die Gütekriterien MAE und NRMS angegeben. Als Ausgangskonzentration wird, die den Versuchen applizierte Nitratkonzentration von β_o =26,8 mg·kg^{-1}, siehe auch Abschnitt 4.2.2.1, bzw. 150 mg·l^{-1} Nitrat in der Testlösung angesetzt. Die berücksichtigten Konzentrationsverläufe $\beta(t)$ ergeben sich somit nach:

$$\beta(t) = \beta_o + E(t), \qquad (4-13)$$

da $E(t) < 0$ definiert ist.

Wird die rechte Seite der Gleichung kleiner bzw. gleich Null, so gehen die Werte $\beta(t)$ nicht in die Bestimmung von λ_1 ein, da dann keine Nitratelimination stattfindet.

<u>NO_3^- - Umsatz nach der Michaelis-Menten-Kinetik (MMK)</u>

Einen Modellansatz für die mikrobielle Stoffumwandlung liefert das Modell von Michaelis und Menten. Die Michaelis-Menten Gleichung, nach MICHAELIS & MENTEN (1913) in der Form, wie beispielsweise in RÖßNER (1996) zitiert, lautet:

$$-\frac{ds}{dt} = v = v_{max} \cdot \frac{s}{K_m + s} \qquad (4-14)$$

Mit s als Stoffkonzentration zum Zeitpunkt t, v_{max} als maximale Stoffabbaurate und K_m als Halbsättigungskonstante. Dabei wird ein Fließgleichgewicht angenommen, das heißt nach einer kurzen initialen Phase bleibt die Konzentration des Enzym-Substrat-Komplexes konstant. Angepasst an die in dieser Arbeit verwendeten Formelzeichen und Definitionen ergibt sich:

$$-\frac{d\beta}{dt} = -R_E = -R_{E\_max} \cdot \frac{\beta}{K_m + \beta} \qquad (4-14a)$$

und integriert über die Versuchsdauer (Zeit t):

$$-R_{E\_max} \cdot t = \beta_o - \beta + K_m \ln\left(\frac{\beta_o}{\beta}\right) \qquad (4-15)$$

Dabei ist hier:

β_o … die Ausgangskonzentration des Nitrates [$mg \cdot kg^{-1}$]

β … die zeitabhängige Konzentration des Nitrates [$mg \cdot kg^{-1}$]

t … die Versuchsdauer [d]

R_E … die Umsatzrate der Elimination [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$]

$R_{E\_max.}$ … die maximale Umsatzrate der Elimination [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$]

K_m … die Halbsättigungskonstante [$mg \cdot kg^{-1}$]

Für ausgewählte Verläufe der Elimination wurden die Parameter K_m und R_{E_max} der Michaelis-Menten-Kinetik angepasst.

Neben der mathematischen Beschreibung der Reaktionskinetik wird eine phänomenologische Bewertung und Charakterisierung anhand der grafischen Darstellungen von E(t) und D(t), sowie deren Raten durchgeführt. Eine Empfehlung für die Mindestversuchsdauer von Batchversuchen wird anhand berechneter Korrelationskoeffizienten gegeben. Diese werden für E_i, G_i oder D_i, Werten aus einer Versuchsdauer weniger Tage, mit E(t), G(t) oder D(t) für t = 365 d bestimmt.

Biochemische Verfügbarkeit der Reduktionsmittel

Der Anteil biologisch verfügbarer Reduktionsmittel kann nur bestimmt werden, wenn die Umsatzprozesse im Batchversuch zum Stillstand gekommen sind. Es wird der Zusammenhang zwischen Reduktionsmittelgehalt und umgesetzter N-Masse im Batchversuch über die Berechnung von Korrelationskoeffizienten (r_s) bestimmt. Weiterhin wurde, wie bereits erwähnt, an ausgewählten Laborversuchen der Reduktionsmittelgehalt zu Versuchsende bestimmt. Eine Bewertung erfolgt durch grafische Gegenüberstellung.

Abhängigkeit von Lachgas- und Nitritbildung

Die Bestimmung der Abhängigkeit von Lachgas- und Nitritbildung erfolgt durch die Berechnung von Korrelationskoeffizienten dieser Konzentrationen mit ausgewählten Parametern der Wasser- und Sedimentbeschaffenheit. Weiterhin wird der Anteil beider N-Produkte an den jeweils insgesamt entstandenen N-Produkten mit diesen Parametern korreliert.

4.2.3 Ergebnisse

4.2.3.1 Zeitlicher Verlauf von Elimination und Denitrifikation

Die Datensätze E(t), β_{NO2}, β_{N2O}, $\beta_{N2(Deni)}$ und S(t) sind in Anlage 2, Blatt 2-20 bis 2-23 enthalten. In Abbildung 4-8 sind die einzelnen Komponenten E(t), D(t) und X(t) gemäß der Definitionen in Abschnitt 4.2.2.3 und die Konzentrationsverläufe von $N_{2(Deni)}$, N_2O und NO_2^- exemplarisch für Versuch W19 dargestellt.

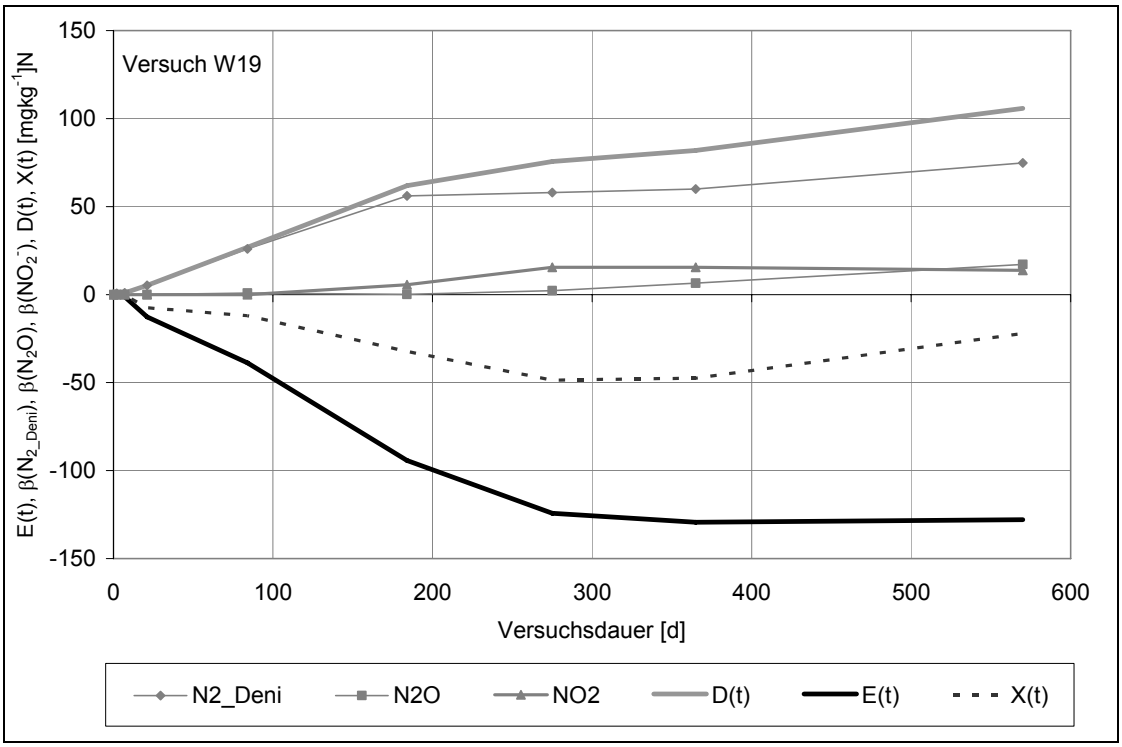


Abbildung 4-8: Darstellung von E(t), D(t), X(t), sowie von $\beta(N_{2\_Deni})$, $\beta(N_2O)$ und $\beta(NO_2^-)$ am Beispiel des Versuches W19

Die zeitlichen Verläufe der Nitratelimination (negativer Wertebereich) und Denitrifikation (positiver Wertebereich) bei den Batchversuchen sind für die 5 Standorte im Folgenden graphisch dargestellt. Dabei werden jeweils die Mittelwerte aus den drei Parallelversuchen herangezogen. Die Standardabweichungen bezüglich der Mittelwerte sind in Anlage 2, Blatt 2-25 angegeben. Für die drei Parallelversuche stimmen die gemessenen Konzentrationen weitestgehend überein. Anhand der folgenden Abbildungen 4-9 bis 4-11 wird deutlich, dass Elimination und Denitrifikation für viele Versuche am Bohrgut aus Wehnsen einen nahezu spiegelbildlichen Verlauf über die Versuchsdauer von 570 d aufweisen. Bei den Versuchen an Bohrkernen des Gebietes Sulingen ist kein spiegelbildlicher Verlauf von Elimination und Denitrifikation, siehe Abbildung 4-12, zu beobachten. Zu beachten an dieser Abbildung ist die im Vergleich zu den vorangegangenen Versuchen feinere Skalierung der y-Achse. An drei der 4 Versuche tritt nahezu keine Nitrit- bzw. Gasbildung auf. Denitrifikation wird somit lediglich an einem Versuch, S123_2 nachgewiesen.

Nach 570 d Versuchsdauer beträgt der mittlere absolute Wert der Elimination E(570d) = 110 $mg \cdot kg^{-1}N$, (s = $\pm$ 95 $mg \cdot kg^{-1}N$) für die untersuchten Sedimente aus Wehnsen. Für die untersuchten Proben aus Sulingen wurde lediglich ein Versuchsansatz über die Dauer von 570 d belassen, an dem E(570d) = 15 $mg \cdot kg^{-1}N$ beträgt. Die anderen Versuchsansätze an Sediment aus Sulingen zeigten eine deutlich geringere Nitratelimnation. Die mittlere Denitrifikati-

on beträgt für Wehnsen D(570d) = 73 mg·kg^{-1}N, (s = ± 75 mg·kg^{-1}N). Für Proben aus Sulingen ist D(570d) < 5 mg·kg^{-1}N.

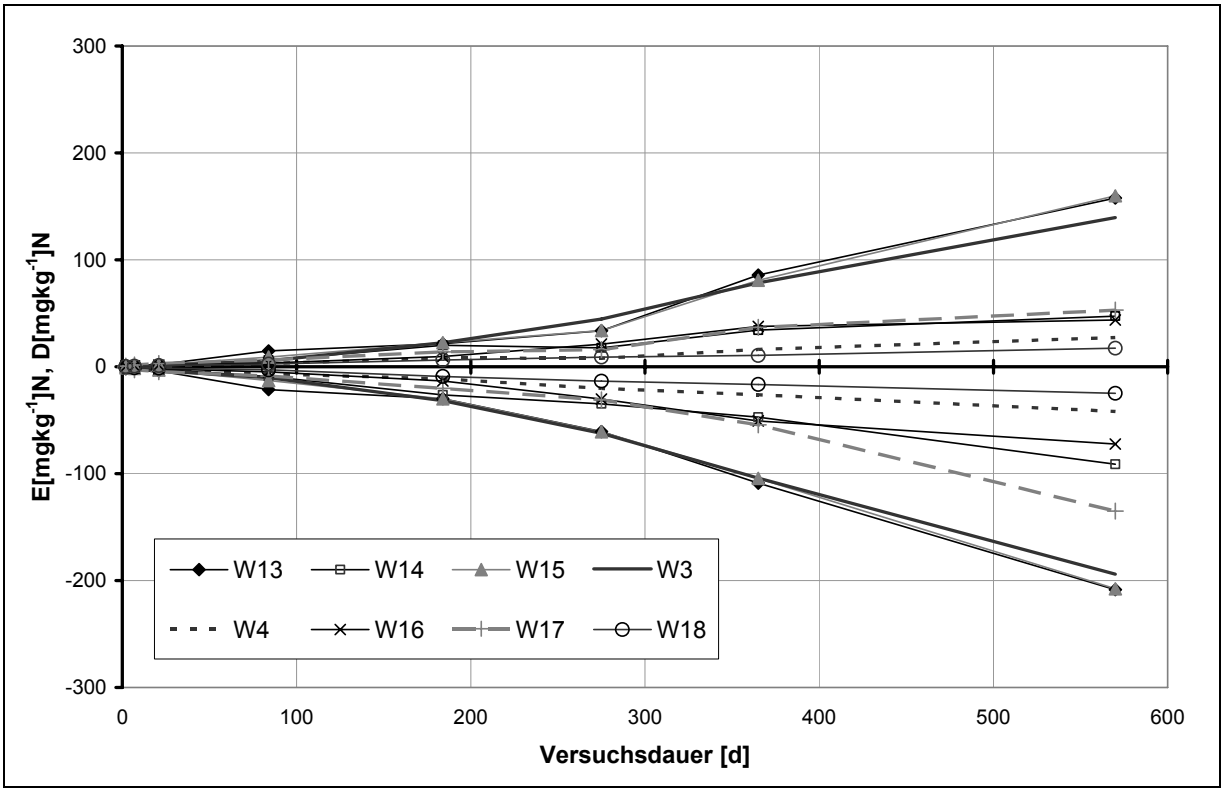


Abbildung 4-9: Elimination (-) und Denitrifikation (+) der Batchversuche an Sedimentproben der Bohrung 2123, Wehnsen

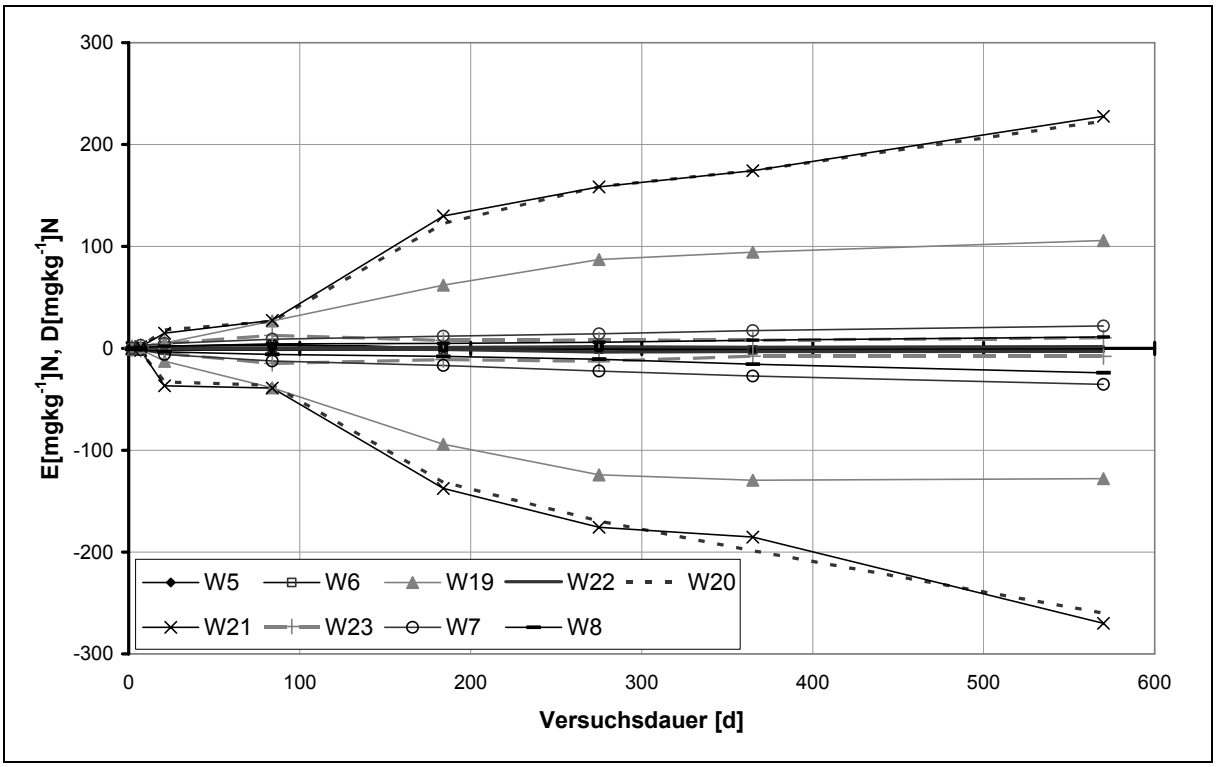


Abbildung 4-10: Elimination (-) und Denitrifikation (+) der Batchversuche an Sedimentproben der Bohrung 2113, Wehnsen

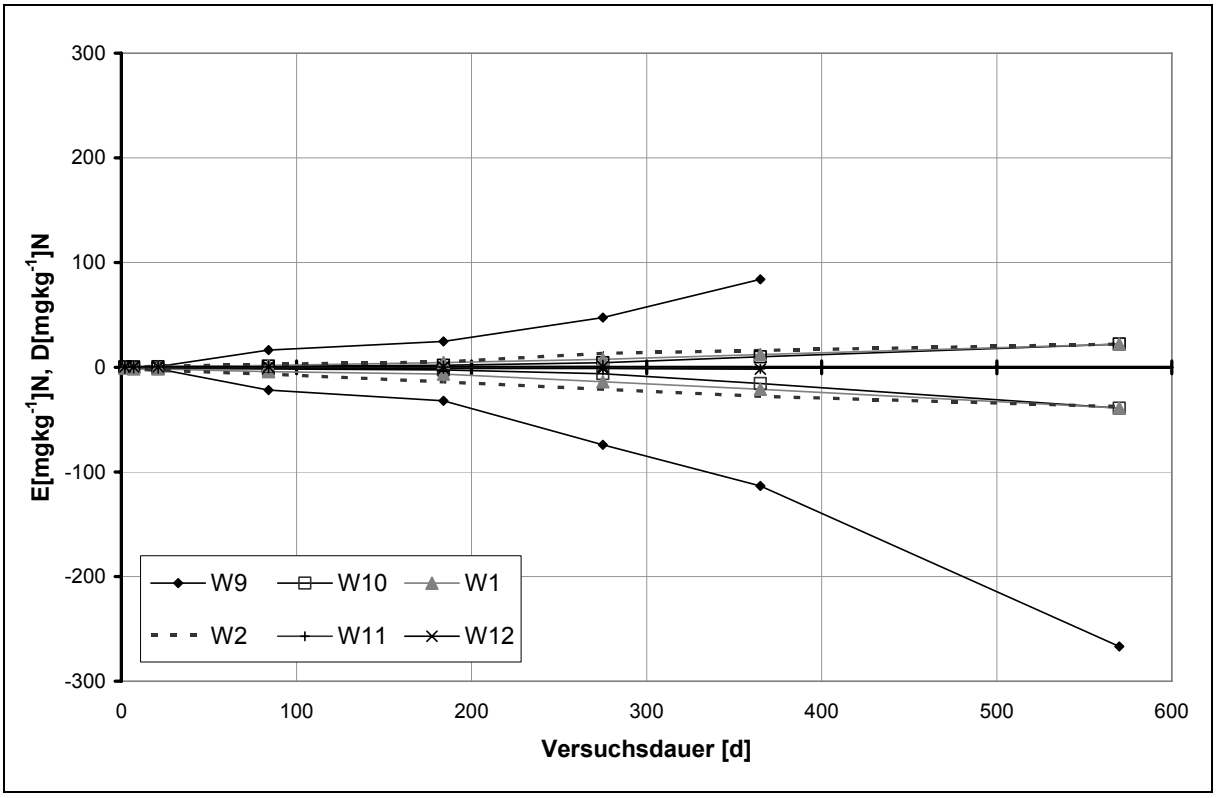


Abbildung 4-11: Elimination (-) und Denitrifikation (+) der Batchversuche an Sedimentproben der Bohrung 2122, Wehnsen

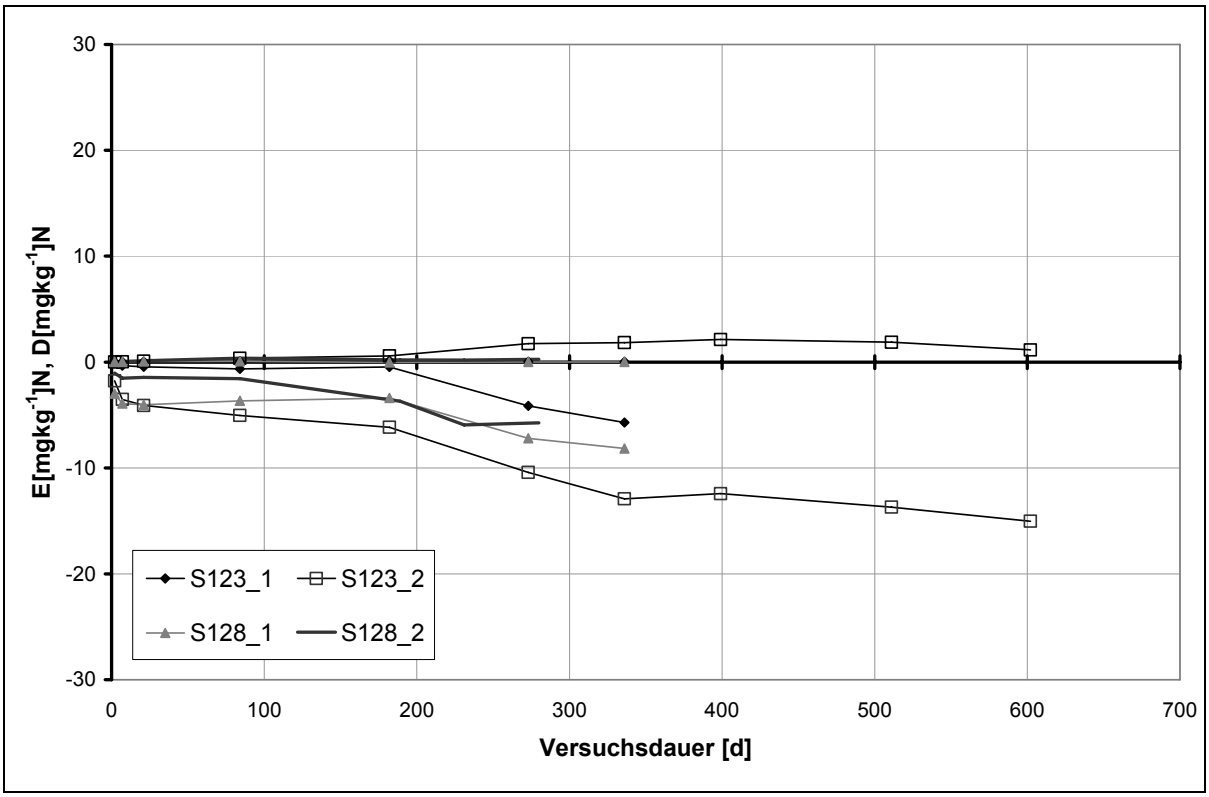


Abbildung 4-12: Elimination (-) und Denitrifikation (+) der Batchversuche an Sedimentproben der Bohrungen S123 und S128, Sulingen

4.2.3.2 Identifikation der Art der Prozesse

Die Abbildungen im vorangegangenen Abschnitt zeigen, dass nicht die gesamte Nitratelimination durch Denitrifikation erklärt werden kann. Die absoluten Werte von X(t) der einzelnen Versuche und der Mittelwert des Anteils von X(t) an der gesamten Elimination der Versuche an Proben aus dem Gebiet Wehnsen sind in Abbildung 4-13 angegeben.

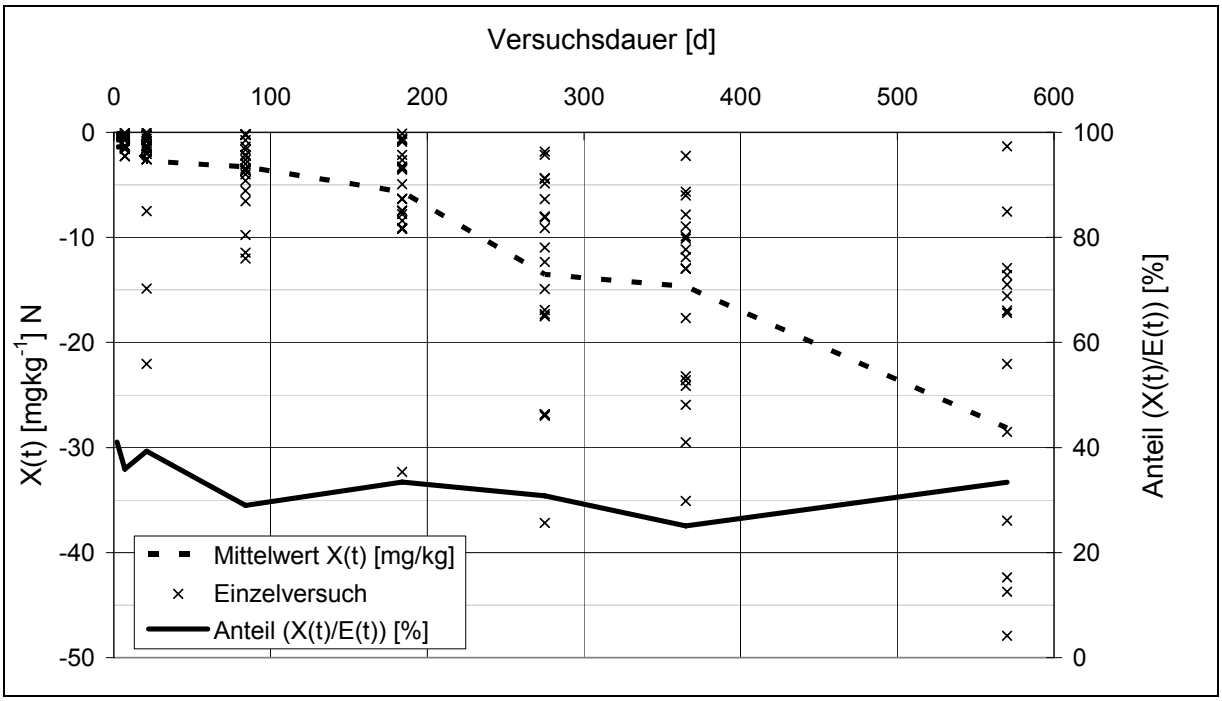


Abbildung 4-13: Absolute Werte von X(t) und Mittelwert des Anteils von X(t) an E(t), Wehnsen

Dieser Darstellung liegt die Berechnung von X(t) nach Gleichung (4 – 9) mit den Daten aus Anlage 2, Blatt 2-20 bis 2-22 zu Grunde. Etwa 30% der Nitratelimination werden nicht durch Denitrifikation widergespiegelt. Mögliche Ursachen werden im Abschnitt 4.2.4 genannt.

Die Korrelationskoeffizienten r_s von -X(t) mit ausgewählten Parametern sind in Anlage 2, Blatt 2-40 und 2-41, basierend auf den Mittelwerten der Parallelversuche enthalten. Ein enger, signifikanter Zusammenhang ergibt sich zwischen –E(t), D(t) und vereinzelt auch mit dem Feinkornanteil, Tabelle A2-33 ebenda. Das heißt, mit steigender Nitratelimination, respektive Denitrifikation, steigt der Anteil nicht-denitrifikativer Nitratelimination.

Im Folgenden wird auf die Prozesse Sorption und dissimlatorische Nitratreduktion zu Ammonium (DNRA) eingegangen. Die Ergebnisse werden im Abschnitt 4.2.4 bewertet. In Abbildung 4-16 sind die Anteile der Elimination exemplarisch für Versuch W23 angegeben.

<u>DNRA:</u>

Lediglich für eine Probe wurden im Zeitraum von 184 d 0,14 mg·kg^{-1} NH_4^+-N gebildet. Der Anteil an der gesamten Nitratelimination beträgt dabei lediglich 0,8%. Für die Versuche an Sedimentproben von Wehnsen und Sulingen sind demnach für einen Versuchszeitraum von etwa ½ Jahr NH_4^+ - bildende Prozesse bedeutungslos. Nach etwa 570 d erfolgte eine erneute Analyse der Versuchslösung auf Ammonium, die an 4 Versuchen ebenfalls nur sehr geringe Konzentrationen zeigt, siehe Tabelle A2-19 in Anlage 2, Blatt 2-27.

Sorption:

Die gemessenen Werte der nach 184 d Versuchsdauer eluierten und irreversibel gebundenen Nitratmasse sind in Anlage 2, Blatt 2-30 und 2-31 aufgeführt. Nur bei etwa der Hälfte der Proben wird Nitrat-N eluiert, meist weniger als 1 mg·kg^{-1}, maximal 4,48 mg·kg^{-1}.

Die $^{15}NO_3^-$ - Messungen zur Bestimmung des irreversibel gebundenen Nitrates ergeben Gehalte von < 1 mg·kg^{-1} N. Die Mittelwerte und Standardabweichungen sind für die irreversible Sorption in Abhängigkeit von der hydraulischen Leitfähigkeit und vom Tongehalt (d<2µm) der Sedimentprobe in Abbildung 4-14 dargestellt. Eine eindeutige Abhängigkeit der Masse irreversibel gebundenen Nitrates zu den Gesteinsparametern ist nicht erkennbar.

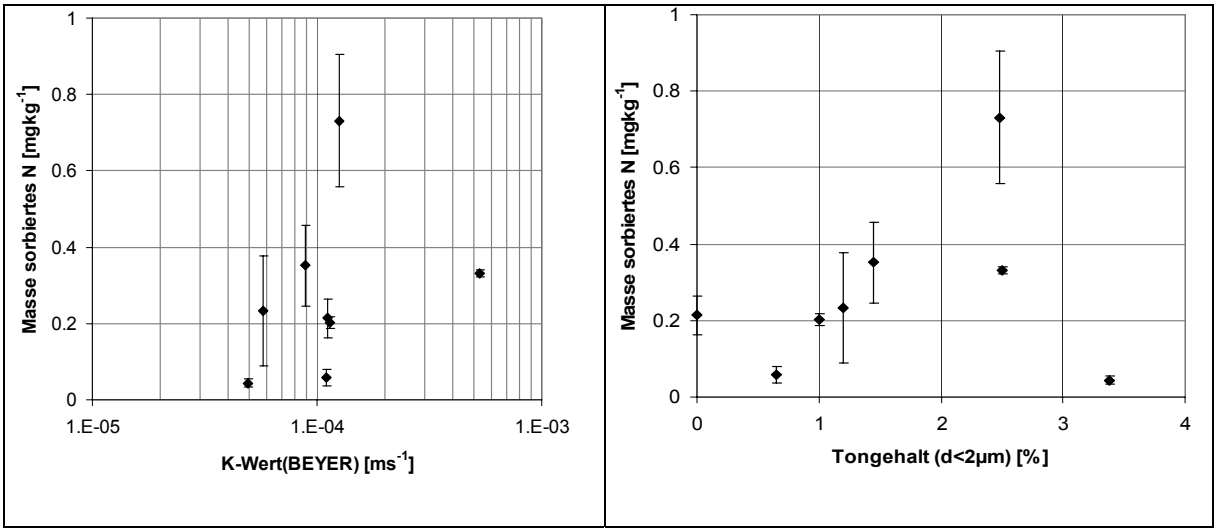


Abbildung 4-14: Irreversible Nitratsorption, gegenüber dem K-Wert und dem Tongehalt

Die sorbierten Nitratanteile wurden für drei ausgewählte Sedimentproben den jeweiligen Kornfraktionen zugeordnet und sind in Abbildung 4-15 enthalten. An den 8 untersuchten Sedimentproben ist der Anteil der irreversiblen Nitratsorption maximal 7,45% der Gesamtelimination. Der maximale absolute Wert beträgt 0,85 mg·kg^{-1}N.

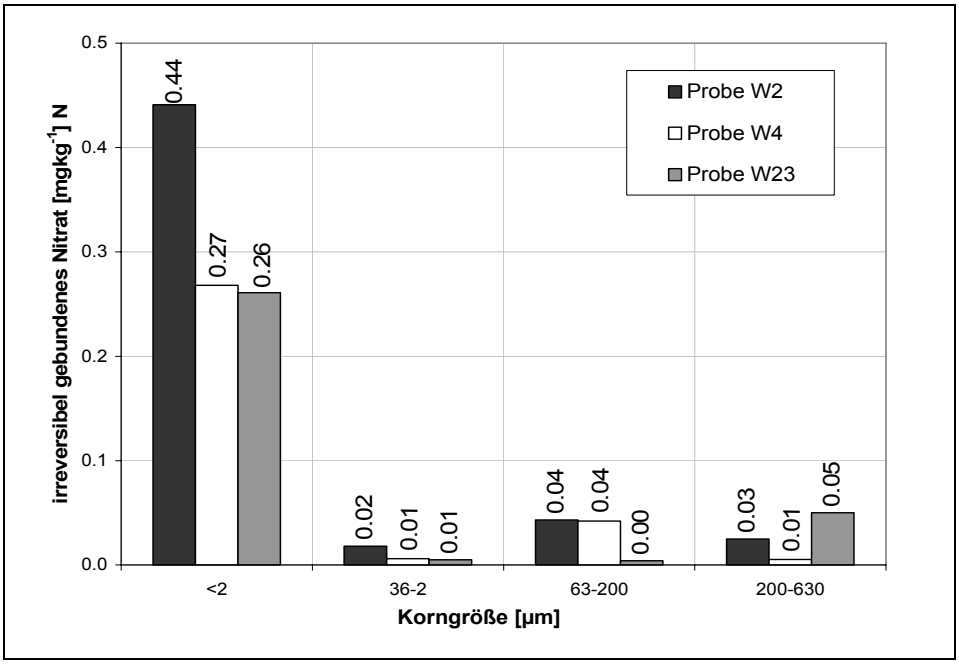


Abbildung 4-15: Sorption von Nitrat in Abhängigkeit der Kornfraktion

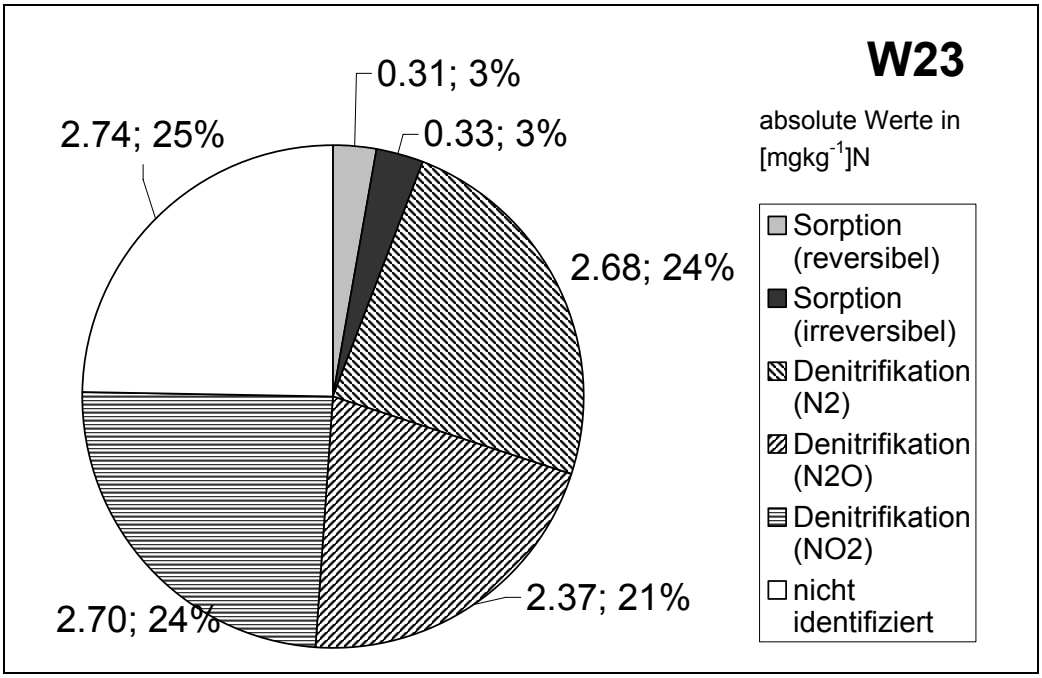


Abbildung 4-16: Anteile der Eliminationsprozesse bei Versuch W23

Art der Denitrifikation:

Indizien für den Ablauf einer organtrophen Denitrifikation:

Eine Versuchsdauer von 1 bis 2 Tagen führt an einigen Versuchen zu einem deutlichen Anstieg der Konzentration des **Kohlendioxids**, wie aus Tabelle A2-17 in Anlage 2, Blatt 2-23 und 2-24 erkennbar ist. Diese kann auch auf eine Oxidation mit gelöstem Sauerstoff zurückzuführen sein, wenn O_2 nicht vollständig durch die N_2-Begasung entfernt worden ist oder ungewollt bei der Befüllung der Batchgefäße eingedrungen ist. Nach einer Versuchsdauer von über 100 Tagen geht die Kohlendioxidkonzentration bei sämtlichen Versuchen um mehr als 50% zurück.

Der **pH-Wert** der Testlösung betrug zwischen pH = 7,5 und pH = 7,8 (Versuchsbeginn). Die Abbildung 4-17 zeigt die Änderung der Konzentration des Hydrogencarbonates und des pH-Wertes nach 184d und 570d nach Versuchsbeginn. Nur an einigen wenigen Versuchen ist eine leichte Anhebung des pH-Wertes und des **Hydrogencarbonates** erkennbar. Beim Großteil der Versuche nehmen pH-Wert und Hydrogencarbonat-Konzentration ab. Die gemessenen Ausgangs-Daten sind in Anlage 2, Tabelle A2-19 und A2-20, Blatt 2-26 bis 2-28, zu finden.

Dabei wird an einigen Versuchen, W17 und W18, der pH = 4 unterschritten und Al^{3+} aus Tonmineralen freigesetzt, welches an diesen Versuchen nach 570 d Versuchsdauer mit einer Konzentration von etwa 10 $mg \cdot l^{-1}$ gemessen wird, siehe Anlage 2, Blatt 2-27 und 2-28. Mit geringeren pH-Werten nimmt die Löslichkeit von CO_2 zu, wodurch geringere Konzentrationen von **Hydrogencarbonat** zu verzeichnen sind.

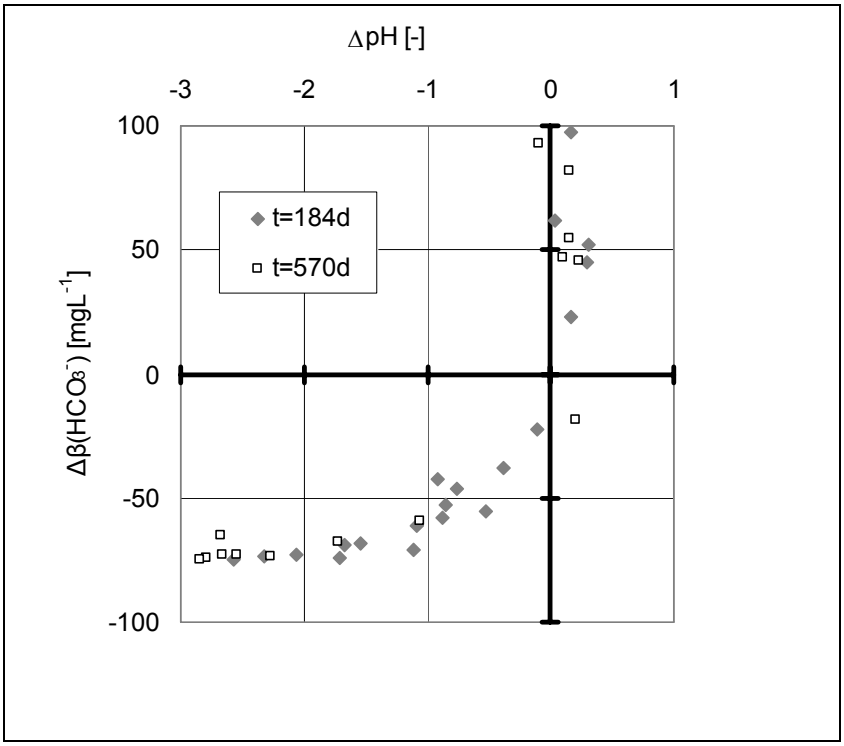


Abbildung 4-17: Änderungen von β(HCO_3^-) und pH-Wert für die Batchversuche

Indizien für den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation:

Nach einer Versuchsdauer von über 100 Tagen geht die **Kohlendioxidkonzentration** in der Gasphase bei sämtlichen Versuchen um mehr als 50% zurück, Tabelle A2-17 in Anlage 2, Blatt 2-23 und 2-24.

Die zeitliche Entwicklung der **Sulfatkonzentration** ist in Tabelle A2-16, in Anlage 2, Blatt 2-23 enthalten und in Abbildung 4-18 grafisch dargestellt. Innerhalb der ersten beiden Versuchstage ist die Konzentration des Sulfates instabil, das heißt, es treten an vielen Versuchen starke Schwankungen auf. Dabei zeigt ein Teil der Versuche nach 1 d bis 21 d Versuchsdauer geringere Konzentrationen als zu Versuchsbeginn. Ein enger Zusammenhang zwischen -E(t) und S(t) wird auch durch hohe, signifikante Korrelationskoeffizienten von r_s = 0,51 bis 0,91, dargestellt in Tabelle A2-30 im Anlage 2, Blatt 2-40 bestätigt.

Die gelösten Konzentrationen von **Mn_{gesamt}** und **Fe_{gesamt}** veränderten sich innerhalb 184 d Versuchsdauer nicht über den möglichen Analysefehler hinaus ($\Delta\beta < \pm$ 0,5 $mg \cdot l^{-1}$), siehe Anlage 2, Blatt 2-26 bis 2-28.

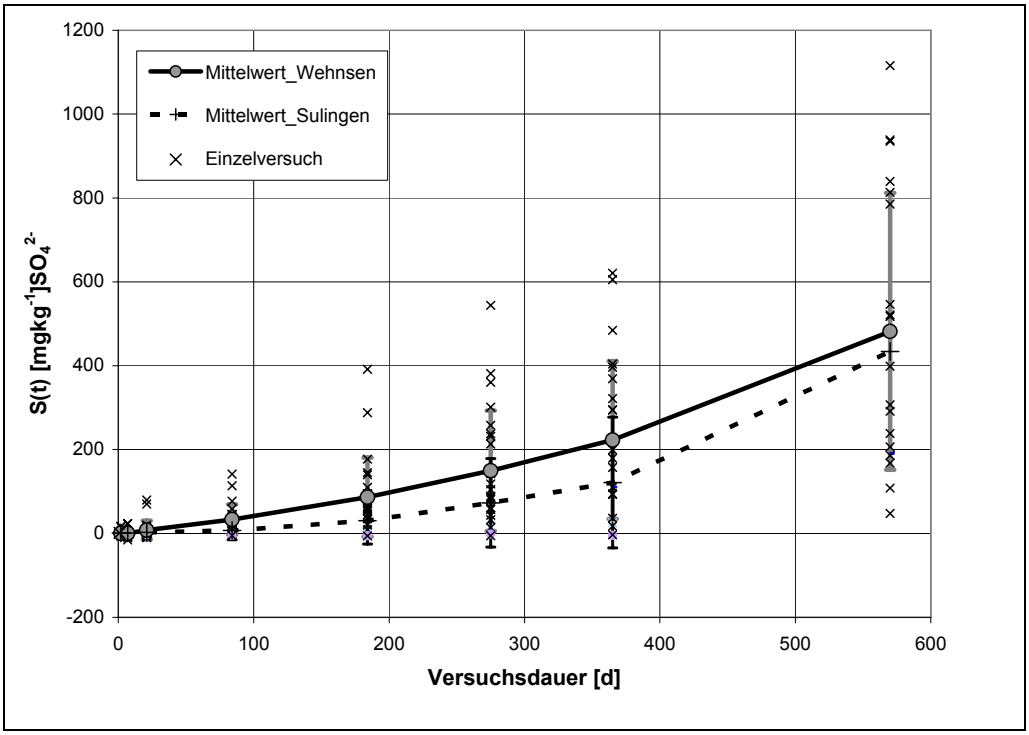


Abbildung 4-18: Sulfatproduktion bei den Batchversuchen

4.2.3.3 Lachgas- und Nitritbildung bei den Batchversuchen

Bei vielen Batchversuchen wurde die Bildung von Lachgas oder Nitrit beobachtet. Die jeweiligen Anteile sind in Abbildung 4-19 bzw. Abbildung 4-20 angegeben. Durchschnittlich betragen die Anteile an NO_2^- bzw. N_2O nicht mehr als jeweils 25% der gesamten N-Produkte der Denitrifikation. Bemerkenswert ist, dass besonders hohe Nitritkonzentrationen jeweils nach der erneuten Zugabe von Nitrat auftreten, siehe Abbildung 4-20. Nach dem meist vollständigem Nitrataufbrauch setzte durch die Injektion von Nitrat die Denitrifikation neu ein. In diesem Anfangsstadium wird besonders viel Nitrit in der Lösung angereichert und oft erst zeitversetzt zu N_2O beziehungsweise zu N_2 umgesetzt.

Da bekannte Einflussgrößen wie Temperatur, pH-Wert und O_2-Gehalt auf die Bildung von NO_2^- und N_2O zu Versuchsbeginn jeweils konstant gewesen sind, wurde geprüft, welche Zusammenhänge zu Parametern des N-Umsatzes und Gesteinseigenschaften bestehen. Sowohl für den Lachgasanteil (N_2O-N/(N_2-N+N_2O-N+NO_2^--N)), als auch für den Nitritanteil NO_2^--N/(N_2-N+N_2O-N+NO_2^--N) wurde r_s mit ausgewählten Parametern bestimmt. Die Werte sind in Tabelle A2-34 und A2-35 in Anlage 2, Blatt 2-41 und Blatt 2-42 enthalten. Signifikante Korrelationen von Lachgas- oder Nitrtitanteil mit beispielsweise E(t), D(t) oder dem Reduktionsmittelgehalt werden nur für einzelne Zeitpunkte innerhalb der Versuchsdauer gefunden. Somit ist anhand der Korrelationskoeffizienten keine eindeutige Aussage über die Abhängigkeit der Lachgas- und Nitritbildung möglich.

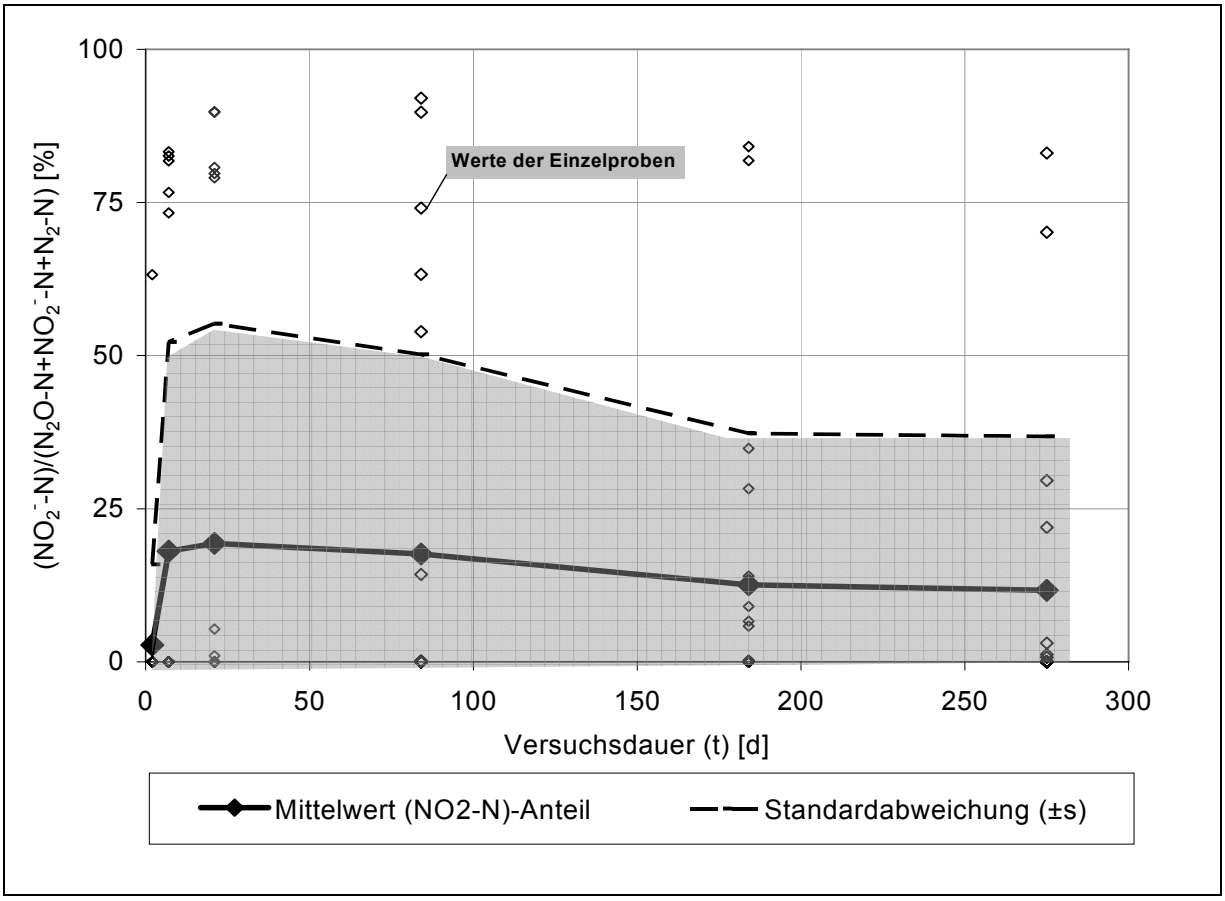


Abbildung 4-19: Zeitlicher Verlauf des Anteils von Nitrit bei den Batchversuchen Wehnsen

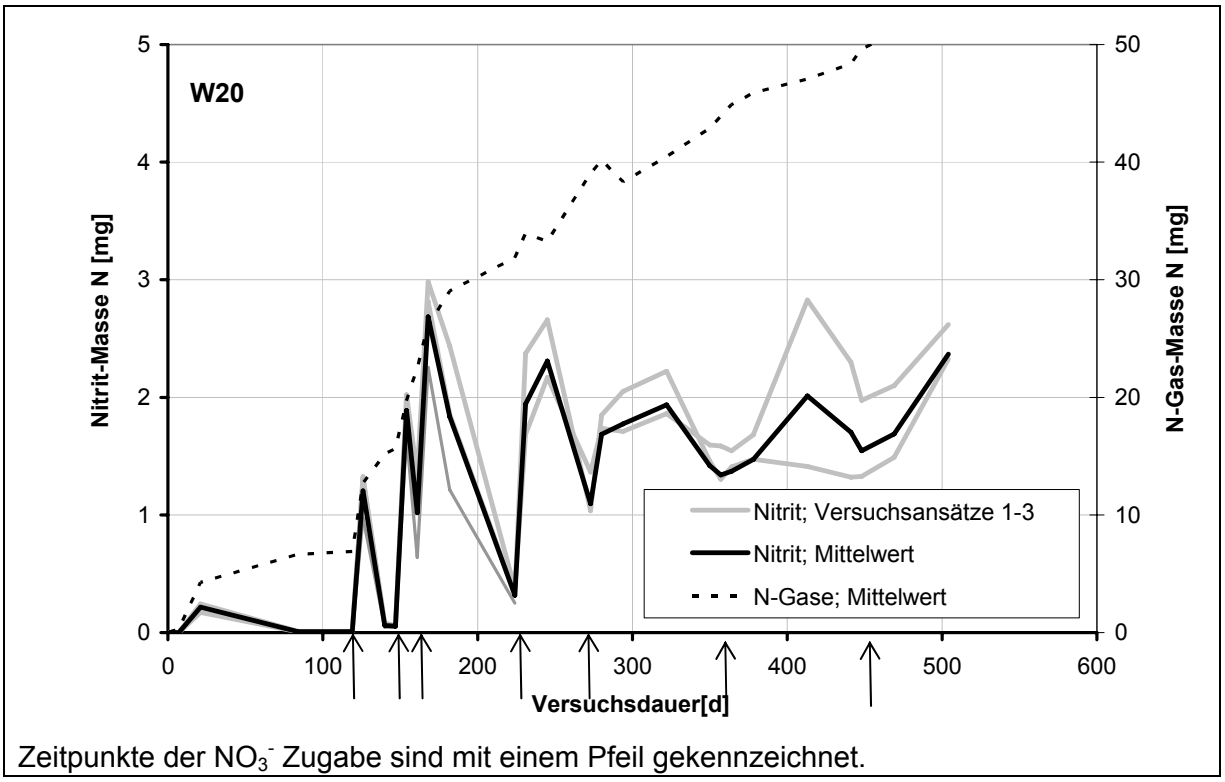


Abbildung 4-20: Exemplarischer Verlauf des Nitrit-Gehaltes am Versuch W20

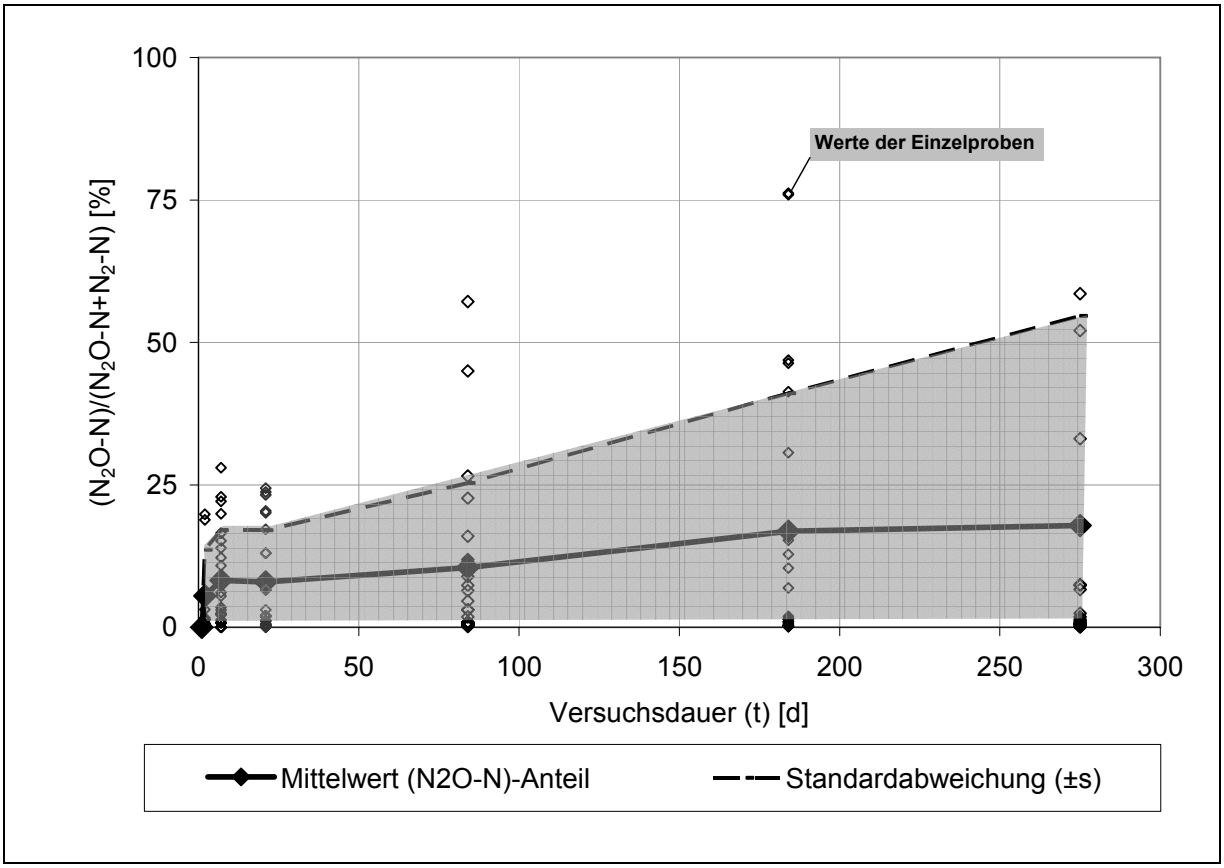


Abbildung 4-21: Zeitlicher Verlauf des Anteils von Lachgas bei den Batchversuchen Wehnsen

4.2.3.4 Beschreibung der Reaktionskinetik

Phänomenologische Klassifizierung

Zur Systematisierung der Versuche am Sedimentmaterial aus Wehnsen wird eine phänomenologische Klassifizierung (Typisierung) nach charakteristischen Zeit-Eliminations- bzw. Denitrifikationsverläufen durchgeführt. Im Anschluss an diesen Abschnitt werden an die Originaldaten von E(t) kinetische Modelle angepasst. Eine Darstellung des zeitlichen Verlaufs der Raten R(t) unterstützt die Interpretation der Typisierung. Die durchgeführten Batchversuche werden in drei phänomenologische Typen unterteilt. Konzentrationsverläufe und zeitliche Verläufe der Raten ausgewählter Parameter sind in Abbildung 4-22 bis Abbildung 4-25 exemplarisch dargestellt. In Tabelle A2-21 und A2-22 in Anlage 2, Blatt 2-29, sind die Zahlenwerte von den Raten der Elimination und Denitrifikation enthalten.

<u>Typ I, nahezu konstante Elimination bzw. Denitrifikation:</u>

Charakteristisch für diesen Typ sind beispielsweise die Versuche W2, W4 oder W18, an denen über die gesamte Versuchsdauer Nitrat umgesetzt wird. Nach einer Versuchsdauer von etwa drei Wochen liegen Elimination und Denitrifikation etwa in der gleichen Größenordnung. An Versuchen dieses Typs ist der Nitratumsatz innerhalb der Versuchsdauer von 570 d noch nicht abgeschlossen, siehe Abbildung 4-22.

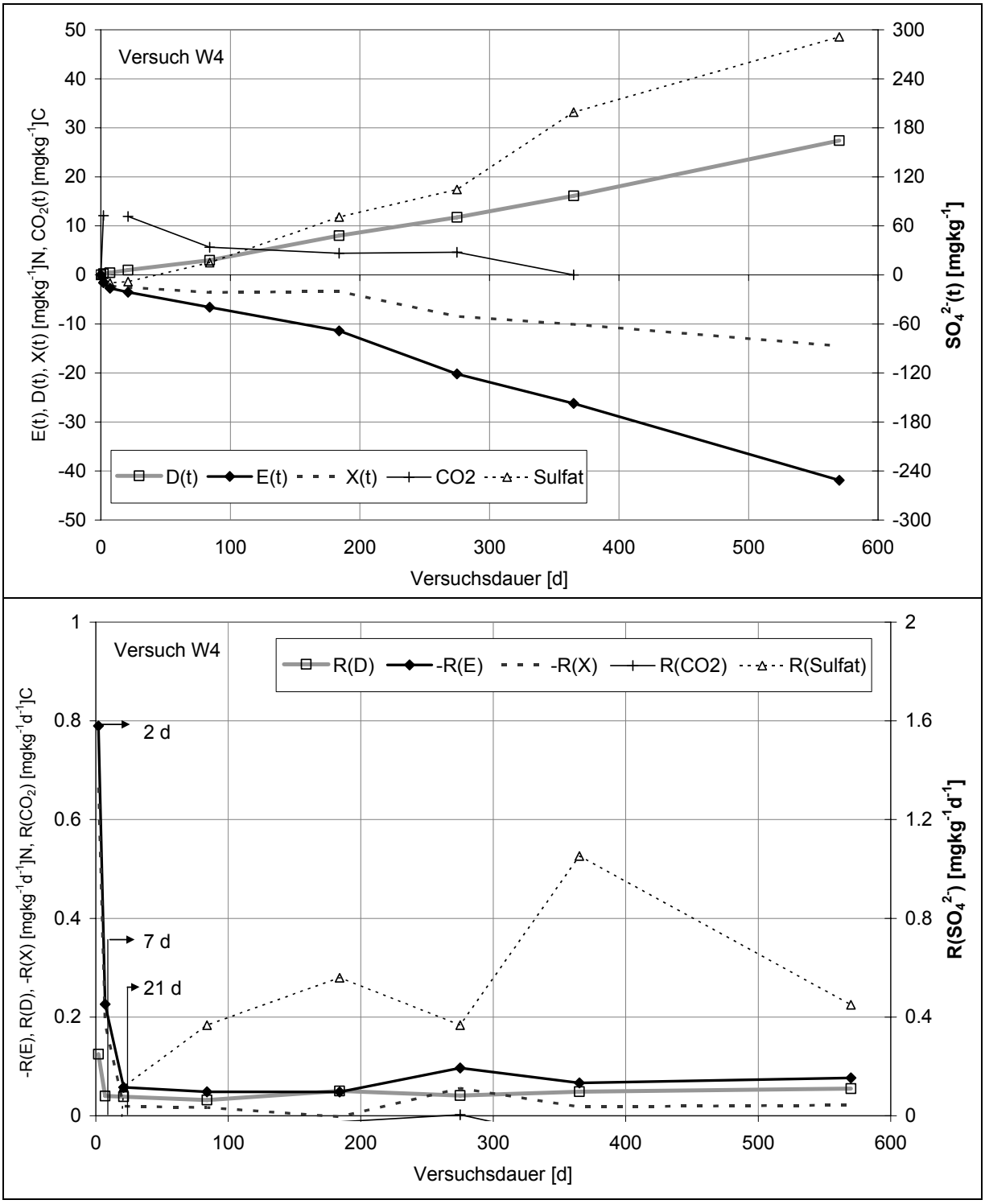


Abbildung 4-22: Beispiel für Typ I mit ausgewählten Konzentrationsverläufen (oben) und Raten (unten)

<u>Typ II, abnehmende Elimination bzw. Denitrifikation</u>

Typ II umfasst Versuche mit einer mehr oder weniger starken Nitratelimination bzw. Denitrifikation zu Versuchsbeginn, die aber innerhalb der Versuchsdauer nahezu zum erliegen kommt, beziehungsweise – wie am Beispiel des Versuches W19 in Abbildung 4-23 – stark abnimmt. Dies betrifft vor allem die Versuche S123_2 und W19. Mit Einschränkung, da zwischenzeitlich Nitrat als limitierender Faktor wirkte, gilt dies auch für die Versuche W20 und W21. Am Beispiel des Versuches W19 sind R(D) und R(-E) zu Versuchsbeginn hoch und

fallen nach 7d Versuchsdauer ab. Der zeitliche Verlauf von E(t) ist dabei nach etwa 300 d Versuchsdauer nahezu konstant.

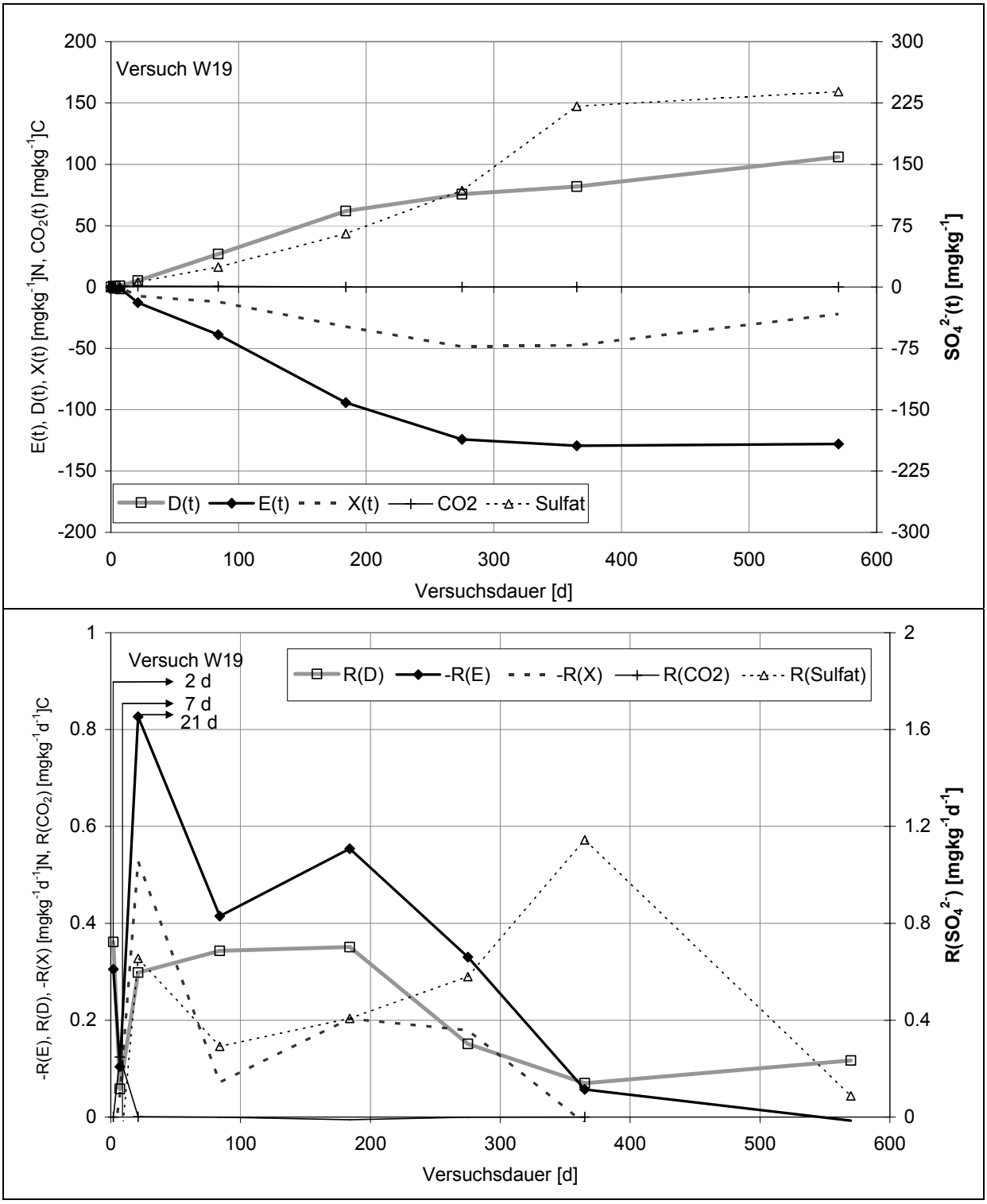


Abbildung 4-23: Beispiel für Typ II mit R(t)

Sonderfälle dieses Typs sind Versuche ohne deutliche Elimination bzw. Denitrifikation, so beispielsweise W5, W6, W11, W12, W22 und S123_1, S128_1 und S128_2. Ein Beispiel ist hierfür mit Versuch W6 in Abbildung 4-24 gegeben, bei dem nahezu keine Denitrifikation erkennbar ist und nach etwa 100 d Versuchsdauer sämtliche Raten zum Erliegen kommen.

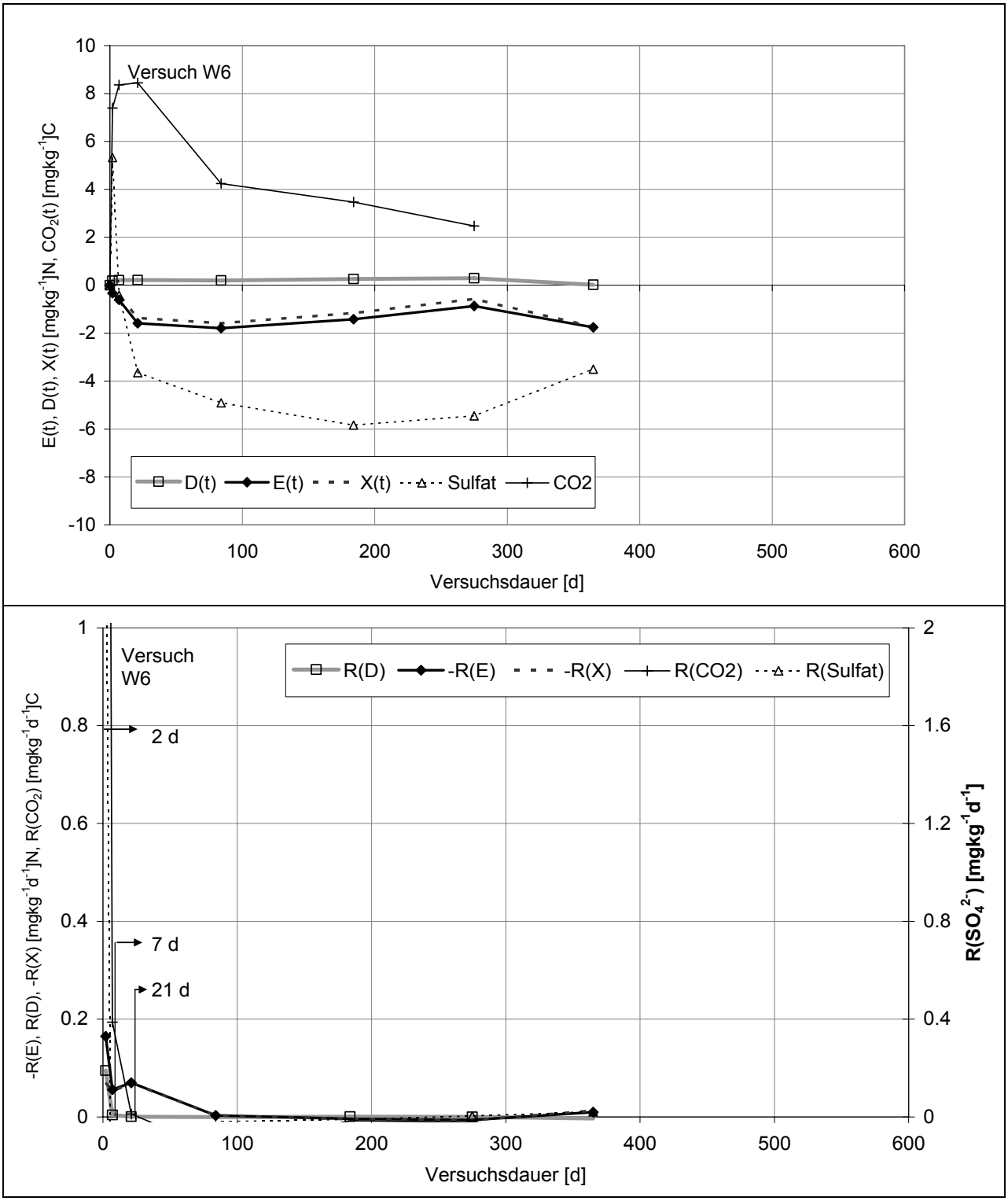


Abbildung 4-24: Sonderfall des Typs II mit R(t)

Typ III, zunehmende Elimination bzw. Denitrifikation

Typ III beschreibt Versuche mit einer ansteigenden Nitratelimination bzw. Denitrifikation. Vertreter dieses Typs sind beispielsweise die Versuche W3, W9, siehe Abbildung 4-25, und W13. Kennzeichnend ist die Zunahme des Nitratumsatzes mit zunehmender Versuchsdauer, die sich in E(t), D(t), S(t) und auch den ansteigenden Raten widerspiegelt.

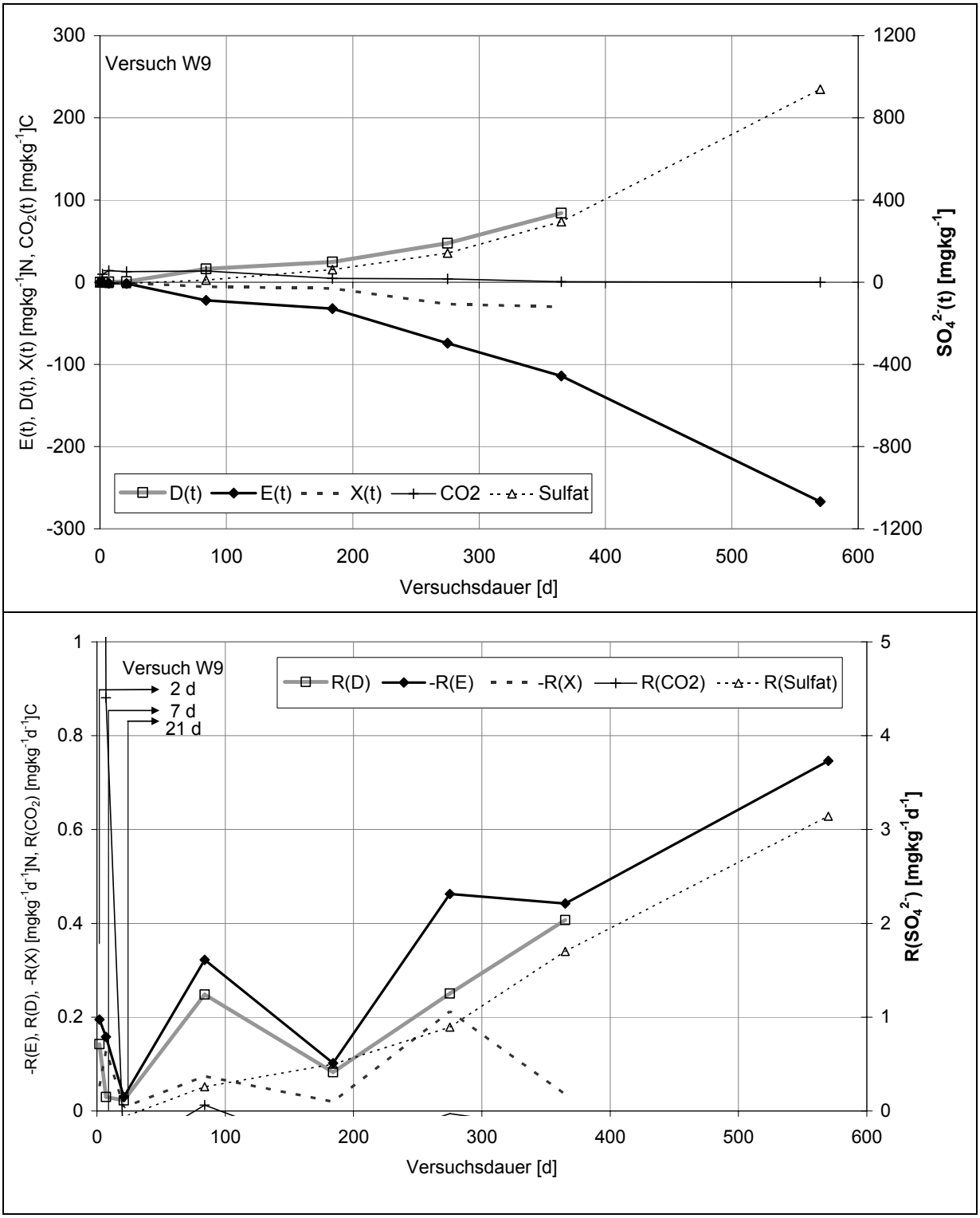


Abbildung 4-25: Typ III mit R(t)

Anpassung von kinetischen Modellen

Die im Folgenden vorgestellten Beziehungen wurden jeweils mit dem Mittelwert aus 3 Versuchsansätzen einer Probe berechnet.

NO_3^- - Umsatz nach einer Reaktion 0. und 1. Ordnung

Die Reaktionskennwerte λ_o und λ_1 wurden nach den Gleichungen (4 – 11) und (4 – 12) berechnet. Diese sind für jeden Batchversuch mit den Werten β_o und den Gütekriterien MAE und NRMS in Anlage 2, Blatt 2-32 enthalten.

Im Grob-/Mittelsand liegt λ_1 für die Proben aus Wehnsen zwischen 0,03 a^{-1} und 7,4 a^{-1}, im Feinsand zwischen 1,8 a^{-1} und 16,8 a^{-1} und an Mergel-/Tonproben zwischen 40 a^{-1} und 135 a^{-1}. Am feinsandigen Sediment aus Sulingen wurden mit λ_1 zwischen 0,18 a^{-1} und 0,51 a^{-1} deutlich geringere Werte ermittelt. Diese Werte gelten für β_o = 26,8 $mg \cdot kg^{-1}$ N (s =±1,9 $mg \cdot kg^{-1}$ N) und eine Versuchsdauer von bis zu t_{max} = 500 d. Der Wert β_o ist dabei der Mittelwert der Nitratkonzentration zu Beginn der Batchversuche an Proben aus Wehnsen und Sulingen.

NO_3^- - Umsatz nach der Michaelis-Menten-Kinetik (MMK)

Anhand der Gleichung (4 – 15) wird deutlich, dass ein linearer Rückgang der Nitratkonzentration, repräsentiert durch Typ I, nicht mit der Michaelis-Menten-Kinetik (MMK) zu beschreiben ist. Ebenso wenig ist eine Anpassung an Typ III möglich, für den $\lambda(t)$ mit abnehmender Konzentration $\beta(t)$ ansteigt. Angepasst wird demzufolge ein Konzentrationsverlauf des Typ II. Am Beispiel (W19), dargestellt in Anlage 2, Blatt 2-31, wurden für einen Batchversuch die Parameter K_m und R_{E_max} der Michaelis-Menten-Kinetik exemplarisch angepasst. Da am Versuch W19 innerhalb eines Jahres E = -129,4 $mg \cdot kg^{-1}$ Nitrat-N, siehe Tabelle A2-13, in Anlage 2, Blatt 2-21, umgesetzt werden, wurde dieser Wert für β_o angesetzt. Für einen Vergleich der Güte der Anpassung werden für diesen Zeitraum nochmals die Gleichungen für eine Reaktion 0. und 1. Ordnung mit den entsprechenden Gütekriterien MAE und NRMS berechnet und in Tabelle 4-6 angegeben.

Tabelle 4-6: Daten zur Anwendung der Michaelis-Mendten-Kinetik (MMK) an Versuch W19

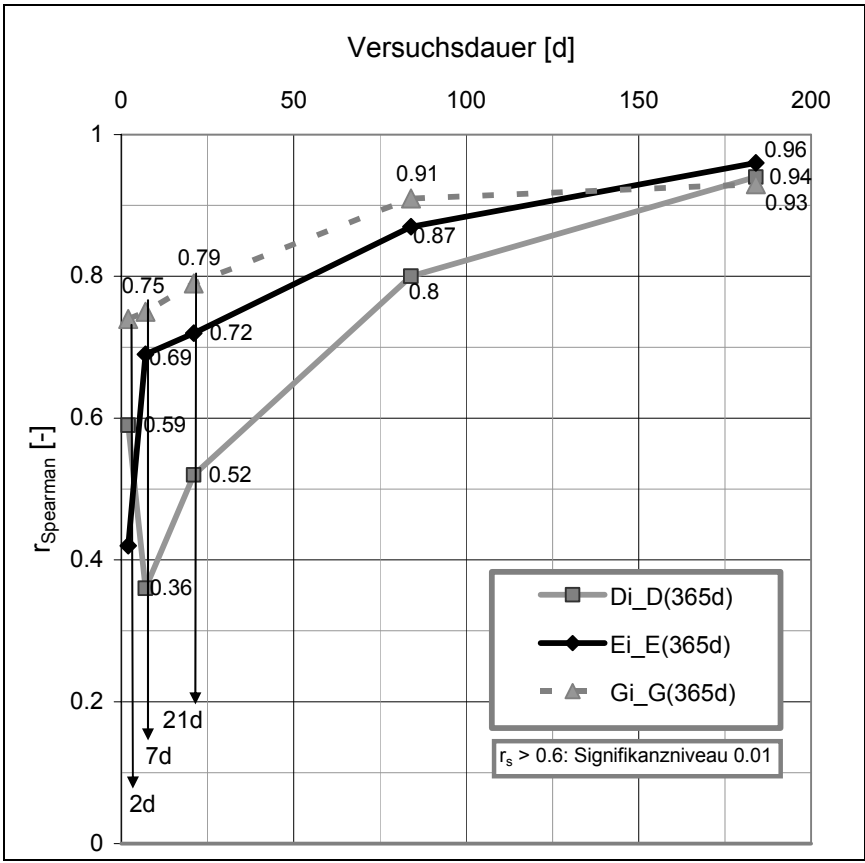
Kinetisches Modell	Gleichung	MAE [$mg \cdot kg^{-1}$]N	**NRMS** [%]
0.Ordnung	$\beta(t)[mgkg^{-1}] = 129{,}4[mgkg^{-1}] - 0{,}4[mgkg^{-1}d^{-1}] \cdot t[d]$	6,9	3,5
1. Ordnung	$\beta[mgkg^{-1}] = 129{,}4[mgkg^{-1}] \cdot e^{-0{,}0252[d^{-1}] \cdot t[d]}$	30,0	12,2
MMK	$0{,}62[mgkg^{-1}d^{-1}] \cdot t[d] = 129{,}4[mgkg^{-1}] - \beta[mgkg^{-1}] + 32[mgkg^{-1}] \ln\left(\frac{129{,}4}{\beta}\right)$	5,5	2,9

Notwendige Mindest-Versuchsdauer

Wie eingangs erwähnt, wurden für eine Bewertung der Versuchsdauer die Korrelationskoeffizienten r_S von $D_i(t)$, $E_i(t)$ und $G_i(t)$ für t = 2 d, 7 d, 21 d, 84 d und 184 d mit den Werten D(365d), E(365d) und G(365d) gebildet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4-26 grafisch dargestellt. Danach besteht zwischen kurzfristiger und langfristiger Gasproduktion bereits nach 2 Tagen Versuchsdauer mit r_s = 0,74 und für die Nitratelimination nach 21 d mit r_s = 0,79 ein enger Zusammenhang. Lediglich für die initiale Denitrifikation $D_i(t)$ und langfristige Denitrifikation D(365d) wird erst für die Werte nach 84 d Versuchsdauer ein mit r_s = 0,80, enger Zu-

sammenhang belegt. Deshalb werden für D(t) in Tabelle 4- 7 keine Regressionsbeziehungen angegeben. Mögliche Ursachen für das Verhalten von D(t) werden im Abschnitt 4.2.4 erläutert.

Um die langfristige Gasproduktion G(365d), beziehungsweise Elimination E(365d) anhand von Ergebnissen aus Versuchen kurzer Dauer abschätzen zu können, werden für und lineare Regressionsgleichungen aufgestellt, siehe Tabelle 4- 7. Die Gleichungen werden mit Gütekriterien bewertet. Die Regressionsgleichungen enthalten kein absolutes Glied. Ein absolutes Glied wäre nicht plausibel, da keine sprunghaften Änderungen der zeitabhängigen Konzentrationen vorliegen.



Ergänzung:

Korrelationskoeffizienten für E(84d) und E(365d) mit 0.87, Signifikanzniveau 0,01, D(84d) und D(365d) mit 0.80, Signifikanzniveau 0,01, G(84d) und G(365d) mit 0.91, Signifikanzniveau 0,01 für alle gilt: n = 23

Abbildung 4-26: Korrelation $r_S(t)$ für initiale und langfristige Denitrifikation/Elimination

Tabelle 4- 7: Korrelationskoeffizienten (r_S) und lineare Regressionsbeziehungen

Parameter[++]	r_S[+]	Regressionsbeziehung	MAE	NRMS
$E(t_{365d}) \rightarrow E(t_{2d})$	*0,42*	$E(t_{365d}) = 73{,}4 \cdot E(t_{2d})$ [mg·kg^{-1} N]	*47,1*	*10,4*
$E(t_{365d}) \rightarrow E(t_{7d})$	0,69	$E(t_{365d}) = 39{,}8 \cdot E(t_{7d})$ [mg·kg^{-1} N]	42,4	10,2
$E(t_{365d}) \rightarrow E(t_{21d})$	0,72	$E(t_{365d}) = 6{,}2 \cdot E(t_{21d})$ [mg·kg^{-1} N]	29,7	4,2
$G(t_{365d}) \rightarrow G(t_{2d})$	0,74	$G(t_{365d}) = 165 \cdot G(t_{2d})$ [mg·kg^{-1} N]	41,4	6,2
$G(t_{365d}) \rightarrow G(t_{7d})$	0,75	$G(t_{365d}) = 76 \cdot G(t_{7d})$ [mg·kg^{-1} N]	31,5	5,1
$G(t_{365d}) \rightarrow G(t_{21d})$	0,79	$G(t_{365d}) = 12 \cdot G(t_{21d})$ [mg·kg^{-1} N]	21,4	4,4

r_S: Korrelationskoeffizient nach Spearman, MAE: mittlere absolute Abweichung [mg·kg^{-1} N], NRMS: normalisierte relative mittlere Abweichung [%], Werte für E(t) in Tabelle A2-30; Signifikanzniveau für r_s für G(t) 0.01 ; [++] für D(t) nicht angegeben, da Korrelationsbeziehungen zu gering, siehe Tabelle A2-30, Anlage 2

4.2.3.5 N-Umsatz und Reduktionsmittel-Gehalt

Abhängigkeit der Prozesse vom Gehalt an Reduktionsmitteln

Die Abbildung 4-27 zeigt die Nitratelimination nach 570 d in Abhängigkeit vom TOC und Sulfidschwefelgehalt zu Versuchsbeginn. Für TOC- oder der Sulfidschwefel-Gehalte kleiner 0.1% beträgt die Denitrifikation teilweise weniger als 1 [mg·kg^{-1}]N, das heißt D(570d) < 1 [mg·kg^{-1}]N. Eine eindeutige Abhängigkeit der Denitrifikation innerhalb einer Versuchsdauer von 570 d vom Ausgangsgehalt an Reduktionsmitteln ist nicht erkennbar.

Es wurde r_S für -E(t), D(t) mit den Gehalten an TOC und S_2^{2-} bestimmt. Die Ergebnisse sind in Tabelle A2-31, Anlage 2, Blatt 2-40 angegeben. Lediglich für E(t) wird über die gesamte Versuchsdauer hinweg eine enge, signifikante Korrelation zum Gehalt an Sulfidschwefel bestimmt. Zu beachten ist, dass der TOC am gestörten Material der Spülbohrung bestimmt wurde und nur mit den in Kapitel 4.1 beschriebenen Einschränkungen mit den Ergebnissen der Batchversuche am Material der Kerne vergleichbar ist.

In Tabelle A2-27, Anlage 2, Blatt 2-33 sind Regressionsgleichungen für die Berechnung von E(365d), D(184d), λ_o und λ_1 aus den Werten für den TOC, Sulfid-Schwefel und den Glühverlust angegeben. Anhand der angegebenen Fehler (MAE) wird deutlich, dass eine Berechnung der genannten Parameter aus dem Gehalt an Reduktionsmitteln mit starken Unsicherheiten behaftet ist.

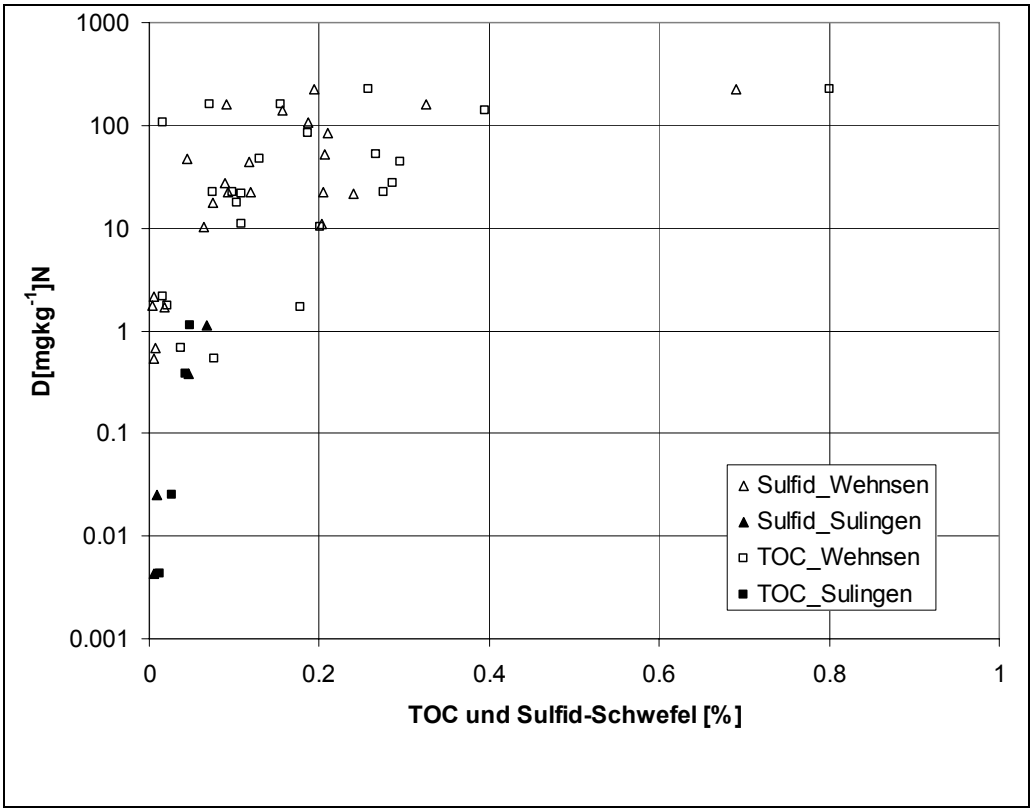


Abbildung 4-27: Sulfid, TOC und Denitrifikation D(570d) an den Batchversuchen

Biologische Verfügbarkeit der Reduktionsmittel

Anhand des gebildeten, gelösten Sulfates wurde der theoretische Verbrauch an Sulfid-S entsprechend der Gleichung 2-8 und 2-10 berechnet. Dabei ist zu berücksichtigen, dass ein – vermutlich nur geringer – Teil des Sulfides durch gelösten Sauerstoff oxidiert worden sein kann. Wird beispielsweise durch Sulfatreduktion gelöstes Sulfat vermindert, so kann dieser Anteil ebenfalls nicht mit berücksichtigt werden. Der Großteil des Sulfides wurde durch Nitrat oxidiert, wie ein Vergleich der Daten in Abbildung A2-6 im Anlage 2, Blatt 2-34, zeigt. Die folgende Abbildung 4-28 zeigt den Sulfid-S-Gehalt nach Gleichung 2-10 zu Versuchsbeginn und den stöchiometrischen Sulfid-S-Verbrauch nach 19 Monaten Versuchsdauer. Die Geraden markieren jeweils den Bereich, in dem 5 %, 10 % bzw. 50 % des gesamten Sulfid-S-Gehaltes umgesetzt worden sind. Der Abbildung ist zu entnehmen, dass innerhalb der Versuchsdauer maximal 50% des vorhandenen Sulfides oxidiert worden sind. An 7 Versuchen (W2, W5, W6, W7, W11, W12, W22), dargestellt als ungefüllte Raute, kam spätestens nach 19 Monaten Versuchsdauer sowohl die Nitratelimination, als auch die Sulfatproduktion zum erliegen. An diesen Proben konnten lediglich etwa 5 % des stöchiometrischen Sulfid-Schwefels tatsächlich durch Nitrat oxidiert werden. An drei weiteren Versuchen (dargestellt als grau gefüllte Raute) war die äquivalente Sulfatproduktion geringer als die entsprechende Nitratelimination einer chemo-lithotrophen Denitrifikation. Die dazugehörigen Daten sind Anlage 2, Tabellen A2-16, Blatt 2-23 und in Tabelle A2-5, Anlage 2, Blatt 2-9 bis 2-11 enthalten.

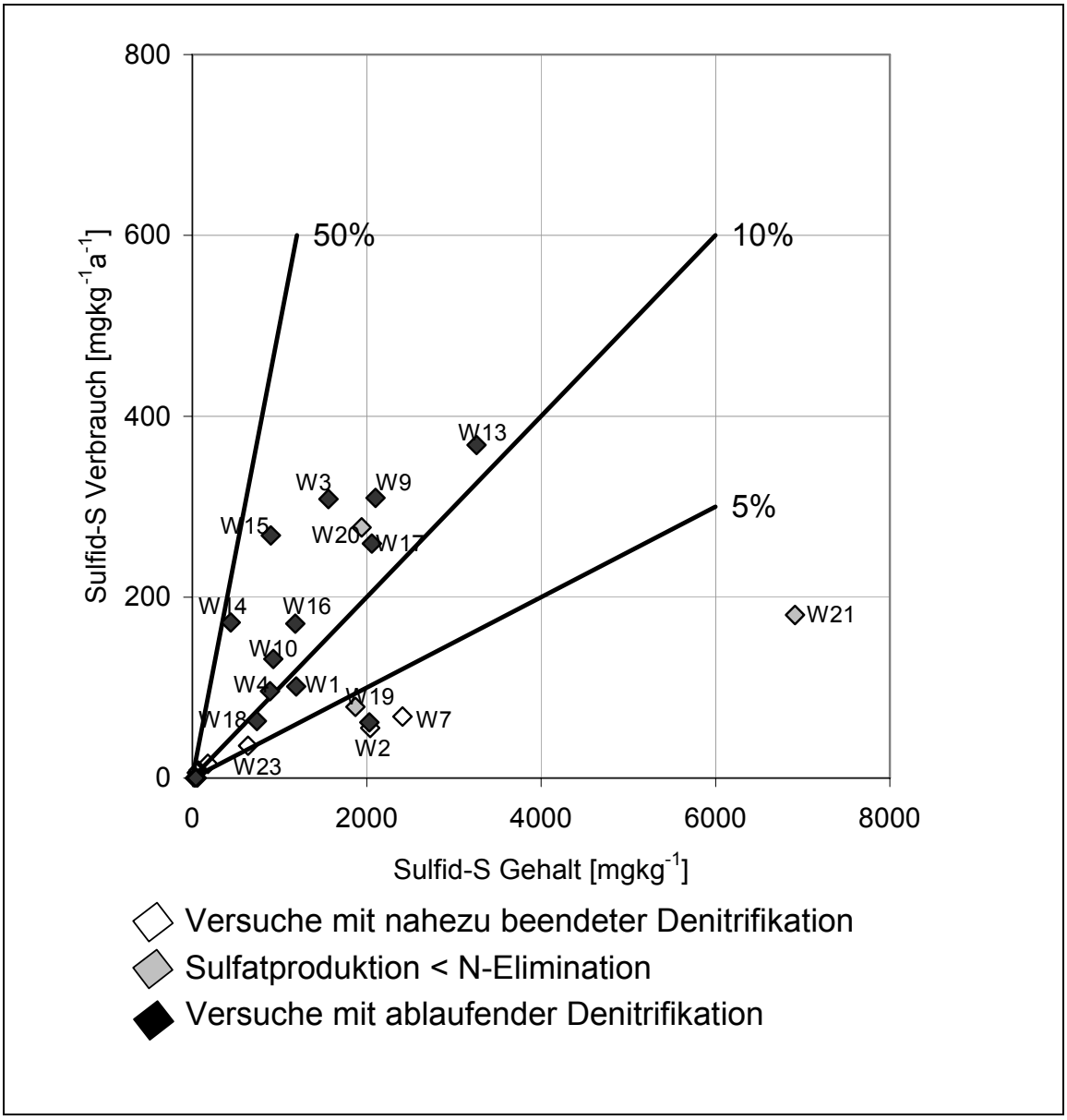


Abbildung 4-28: Sulfid-Schwefelgehalt zu Versuchsbeginn und Sulfid-Schwefel-Verbrauch innerhalb einer Versuchsdauer von 570 d

Die Abbildung 4-29 zeigt den gemessenen Sulfidgehalt vor Versuchsbeginn und den nach 570d Versuchsdauer gemessenen S_2^{2-} -Gehalt, siehe auch Tabelle A2-6 in Anlage 2, Blatt 2-11. Für 5 Proben wird nach 19 Monaten Versuchsdauer ein höherer Gehalt an Sulfid-S bestimmt, als zu Versuchsbeginn. Angegeben in dieser Abbildung ist ebenfalls die Menge an gebildetem Sulfat-S. Die Addition von Sulfid-S und gelöstem Sulfat-S nach 570 d Versuchsdauer ergibt allerdings nicht die Ausgangsmenge an Sulfid-S zu Versuchsbeginn. Mögliche Ursachen werden im Abschnitt 4.2.4 betrachtet.

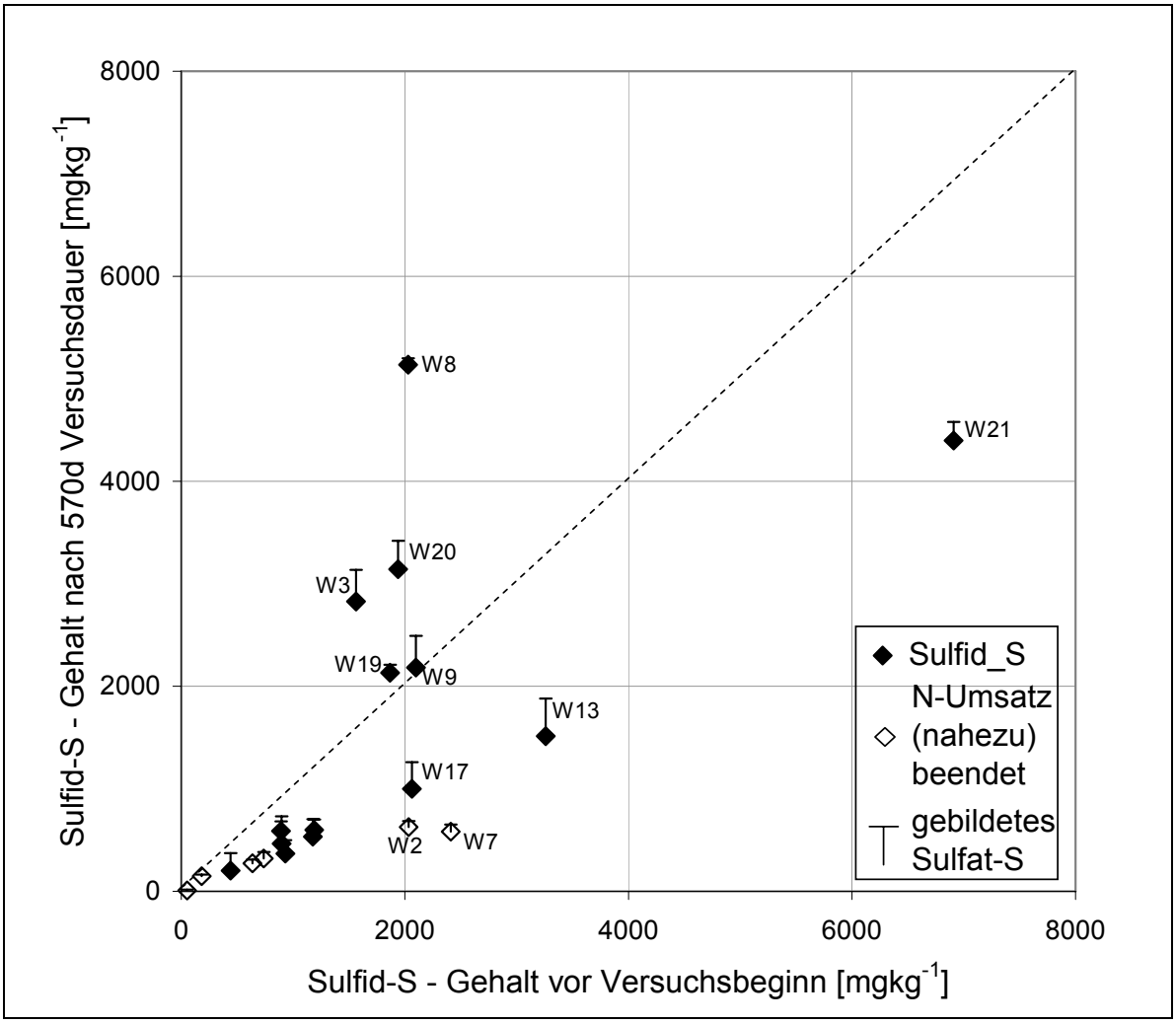


Abbildung 4-29: Sulfid-S vor Versuchsbeginn und nach 570 d Versuchsdauer, sowie gebildetes Sulfat-S

4.2.4 Diskussion und Bewertung

In den vorangegangenen Abschnitten wurden die Ergebnisse von Batchversuchen am Sediment aus Bohrungen in zwei Gebieten Norddeutschlands dargestellt. In diesem Abschnitt werden die Resultate bewertet und diskutiert.

Größenordnung und Art der Nitratelimination

Mit Sedimentproben ausgewählter Bohrkerne wurden aus Wehnsen 23 und Sulingen 4 jeweils drei parallele Batchversuche mit $^{15}NO_3^-$ durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen für Wehnsen und Sulingen deutliche Unterschiede: Aus dem zeitlichen Verlauf der Nitratkonzentration wurde die Elimination E von Nitrat bei den Versuchen am Sediment aus Wehnsen mit einem absoluten Betrag von maximal etwa E = -270 $mg \cdot kg^{-1}$ N bestimmt, siehe Abbildung 4-10. Hingegen beträgt der Absolutwert der maximalen Nitratelimination an den untersuchten Sedimenten aus Sulingen lediglich E = -15 $mg \cdot kg^{-1}$ N, siehe Abbildung 4-12. Eine mögliche Ursache für diese Unterschiede, kann der an den Versuchen des Sedimentes aus Sulingen gegenüber den Proben aus Wehnsen, höhere Sauerstoffgehalt in den Batchgefäßen sein. Dieser beträgt nach 184 d in Versuchsansätzen aus Sulingen durchschnittlich $\beta(O_2)$ = 4,89 $mg \cdot l^{-1}$, siehe auch Anlage 2, Blatt 2-28, hingegen für Anätze mit Sediment aus Wehnsen $\beta(O_2)$ = 0,37 $mg \cdot l^{-1}$, siehe auch Anlage 2, Blatt 2-26. Diese unterschiedlich hohen O_2-Gehalte

sind nicht erklärbar, da die Versuchsansätze für beide Gebiete vollkommen identisch durchgeführt worden sind. Prinzipiell können O_2-Gehalte in der mit N_2 begasten Testlösung auch auf Luftkontakt der Probe während der Messung zurückzuführen sein. Möglich erscheint auch ein Sauerstoffzutritt durch das zwar doppelte Septum, welches aber zu jeder Probenahme mit einer Kanüle durchstochen wurde und so mit fortschreitender Versuchsdauer perforiert wurde. Ingesamt ist das Milieu für die Proben aus dem Aquifer Wehnsen sauerstoffarm und eine Behinderung der Denitrifikation durch zu hohe Sauerstoffgehalte ist für die gemessenen Zeitpunkte nicht zu befürchten. An den Versuchsansätzen aus Sulingen wurde der Ablauf einer Denitrifikation durch gelösten Sauerstoff vermutlich behindert.

Es liegen wenige Ergebnisse zur Nitratelimination von Versuchen vergleichbarer Dauer vor. In Sandböden wurde bei Versuchen von MEHRANFAR (2003) innerhalb einer Versuchsdauer von 500 d zwischen 15 und 81 $mg \cdot kg^{-1}$ N umgesetzt, für Lehmböden teilweise die 10fache Menge. WALTHER et al. (2002) bestimmen am Sediment des GWL Thülsfelde innerhalb einer Versuchsdauer von 65 d eine Nitratelimination zwischen 10 und 66 $mg \cdot kg^{-1}$N, die, bezogen auf die Dauer eines Jahres, in gleicher Größenordnung liegt. Eine weitere Gemeinsamkeit der hier vorgestellten Ergebnisse mit Literaturwerten ist das weite Spektrum an Werten für augenscheinlich gleiche Sedimente. Daran wird deutlich, dass Untersuchungen zum Nitratumsatz standortspezifisch durchgeführt werden sollten.

Findet bei einem Batchversuche Denitrifikation statt, so setzt diese bereits nach Stunden ein, da erhöhte Gaskonzentrationen bereits nach 1 bis 2 Tagen Versuchsdauer gemessen werden, siehe Abbildung 4-9 bis Abbildung 4-11. Eine Anpassung der Mikroorganismen über mehrere Tage oder Wochen ist offensichtlich nicht notwendig. Wie auch von MEHRANFAR (2003) beobachtet, war die Rate der Nitratelimination zu Versuchsbeginn am höchsten. Die hier festgestellten Maximalwerte der Rate von 1,765 $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ N, siehe Tabelle A2-21, Anlage 2, Blatt 2-29, liegen etwa in der gleichen Größenordnung wie der von MEHRANFAR (2003) beobachteten Maximalwerte von 2,5 $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ Nitrat-N. Vergleichbar ist ebenfalls der Verlauf der Raten der CO_2-Produktion, der durch einen anfänglichen Anstieg bis etwa drei Wochen Versuchsdauer und einem anschließenden Abfall bis $R_{CO2}(t) \approx 0$ gekennzeichnet ist, siehe Abbildung 4-22 bis Abbildung 4-25.

Die Denitrifikation D wurde beim Großteil der Versuche mit <1 bis 228 $mg \cdot kg^{-1} \cdot a^{-1}$N, siehe Abbildung 4-10, zwar in ähnlicher Größenordnung wie E bestimmt, dennoch trat bei nahezu allen Versuchen eine Differenz der absoluten Werte von E und D auf, siehe Abbildung 4-13. Mit steigender Nitratelimination, respektive Denitrifikation, steigt diese Differenz. Ursachen dafür können der Ablauf weiterer Eliminationsprozesse neben der Denitrifikation, aber auch Messfehler, Gasverluste bei der Probenahme oder fehlerhafte Umrechnungen sein. Da die Raten der Elimination und Denitrifikation für einzelne Zeitabschnitte und Versuche identisch sind, siehe beispielsweise Abbildung 4-22, Abbildung 4-23 oder Abbildung 4-25, kann ein systematischer Fehler bei der Gasprobenahme und Auswertung der Analyseergebnisse ausgeschlossen werden. Somit wird neben der dominierenden Denitrifikation auf den Ablauf weiterer Eliminationsprozesse geschlossen. Um diese zu spezifizieren, wurde nach 184 d Versuchsdauer ein Parallelansatz der Versuche aufgelöst. Das Sediment wurde auf den Gehalt eluierbaren und – an ausgewählten Proben – auf den Gehalt nicht-eluierbaren Nitrates untersucht, siehe Abschnitt 4.2.3.2. Der Maximalgehalt eluierbaren Nitrates betrug 4,48 $mg \cdot kg^{-1}$ N (Anlage 2, Blatt 2-30), wobei aber am Großteil der Proben kein eluierbares Nitrat festgestellt worden ist. Irreversibel sorbiert wurden maximal 0,85 $mg \cdot kg^{-1}$ N, wie die $^{15}NO_3^-$ -Analyse des Sedimentes ergab, siehe Abbildung 4-14, beziehungsweise Tabelle A2-24,

Anlage 2, Blatt 2-31. Damit wird Nitratsorption an Aquifersedimenten nachgewiesen. Eine Kornfraktionierung an drei Proben zeigte, dass >80% des irreversibel gebundenen Nitrates an der Tonfraktion erfolgt, siehe wiederum Abbildung 4-14. Ist Ton in hydraulisch aktiven Bereichen verteilt, so ist eine Nitratelimination durch irreversible Sorption prinzipiell möglich, jedoch quantitativ unbedeutend. Nitratsorption an tonig-schluffigem Lehm in ähnlicher Größenordnung mit 0,17 $mg \cdot kg^{-1}$ N fanden CLAY et al. (2003). DNRA kann anhand der Analysen von NH_4^+ als quantitativ bedeutender Eliminationsprozess ausgeschlossen werden, siehe Abschnitt 4.2.3.2. Andere Prozesse der Nitratelimination konnten mit den angewendeten Methoden nicht identifiziert werden.

Wird mit dem Rückgang gelösten Nitrates zeitgleich keine äquivalente N_2-, N_2O- oder NO_2^- -Bildung nachgewiesen, ist eine (temporär) quantitativ bedeutende Bildung von NO (Stickstoffmonoxid) möglich. NO wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht analysiert. MCKENNY et al. (1982) geben für einen Säulenversuch (Ton) bei 20°C etwa die doppelte NO Menge gegenüber N_2O an. YE et al. (1994) geben eine Übersicht über die Rolle von NO bei Ablauf der Denitrifikation, die an genetische und enzymatische Faktoren der beteiligten Mikroorganismen geknüpft ist. Umfassend sind Metabolismus und Reduktase von NO in ZUMFT (1997) dargestellt. Dennoch erscheint eine wesentliche NO-Freisetzung aus der Denitrifikation wenig wahrscheinlich. Die genannte NO-Bildung von Böden ist vermutlich der Nitrifikation zuzuordnen. Wegen der NO Toxizität ist eine NO-Akkumulation kaum denkbar und wurde in wassergesättigten Systemen nie beobachtet. Die Bilanzlücken sind daher vermutlich auf systematische Fehler zurückzuführen: Durch Summierung von Bilanzfehlern durch mehrfache Beprobung, Gasverluste, Quantifizierung der Volumina und Löslichkeiten kann es leicht zu größeren Bilanzlücken kommen. Um diese Abzuschätzen wären sehr aufwendige 15N-Wiederfindungsversuche (T0-Kontrolle) notwendig gewesen, die hier nicht durchgeführt worden sind.

Messungen von CO_2 in der Gasphase, des gelösten O_2, SO_4^{2-}, HCO_3^-, Fe_{gesamt} und des pH-Wertes, siehe Abbildung 4-18, Blatt 2-23 bis 2-24 und Blatt 2-26 bis 2-28 in Anlage 2, ergaben, dass (a) zu Versuchsbeginn, d.h. innerhalb von drei Wochen Versuchsdauer, geringe Mengen von Kohlenstoff durch Sauerstoff oder Nitrat (chemo-organotrophe Denitrifikation) zu CO_2 oxidiert werden, (b) nach einer Versuchsdauer von wenigen Tagen für die meisten Versuche eine chemo-lithotrophe Denitrifikation einsetzt, die den dominierenden Prozess der Elimination des Nitrates darstellt, (c) die Denitrifikation bei sehr vielen Versuchen zu einer starken Versauerung der Versuchslösung (bis pH = 3,5) führt, wodurch teilweise Al^{3+} freigesetzt wird und (d) die chemo-lithotrophe Denitrifikation beide Teilschritte umfasst und somit kein Fe^{2+} in Lösung bleibt. Die beobachtete Abnahme der CO_2-Konzentration kann auch mit dem Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation erklärt werden, bei der anorganischer Kohlenstoff, wie beispielsweise CO_2 oder HCO_3^- als Zellkohlenstoff bezogen werden kann, SCHLEGEL (1992). Abnehmende Sulfatkonzentrationen zu Versuchsbeginn können durch Sorption erklärt werden. Eine Sulfatreduktion (Desulfurikation) sollte zu diesem Zeitpunkt ausgeschlossen sein, da Nitrat bei allen Versuchen im Überschuss vorhanden ist. An einigen Ansätzen, vor allem an den Proben aus Sulingen übersteigt die Sulfatkonzentration die stöchiometrisch möglichen Äquivalentkonzentrationen der chemo-lithotrophen Denitrifikation, siehe Abbildung A2-6 in Anlage 2, Blatt 2-34. Eine mögliche Erklärung ist die Oxidation des Sulfidschwefels mit Sauerstoff, der über poröse Septen und als Nebeneffekt der Probenahme in das Batchgefäß eindringt. Empfehlenswert für künftige Untersuchungen ist eine permanente Überwachung des Gehaltes an gelösten Sauerstoff in der Versuchslösung

mit entsprechender Messtechnik (Mikrosonden). Das Absinken des pH-Wertes, siehe Abbildung 4-17, beruht vermutlich auf dem 2. Teilschritt der chemo-lithotrophen Denitrifikation, bei dessen Ablauf H^+- Ionen freigesetzt werden. Von Bedeutung ist dabei, dass die Denitrifikation auch bei pH < 4 abläuft, siehe Abbildung A2-5, in Anlage 2, Blatt 2-33. Am Material der Batchversuche ist die Säurepufferkapazität erschöpft.

Abhängigkeit der Lachgas- und Nitritbildung

Die Denitrifikation entspricht der Summe der N-Produkte, $N_{2(Deni)}$, N_2O und NO_2^-. Da teilweise quantitativ bedeutende Konzentration von N_2O (β_{max} = 45,57 mg·kg^{-1}N, Tabelle A2-14, Anlage 2, Blatt 2-21) und NO_2^- (β_{max} = 15,46 mg·kg^{-1}N, Tabelle A2-12, Anlage 2, Blatt 2-20) gemessen worden sind, ist für Versuche dieser Art die Analyse dieser beiden Reaktionsprodukte notwendig. Die Nitritgehalte sind besonders nach der Zugabe von Nitrat bedeutend, siehe Abbildung 4-20, die anschließend wiederum absinkt. Diese Beobachtung deckt sich mit Literaturangaben sowohl für Laborversuche, siehe HARTOG (2003), als auch für in situ Versuche, siehe SMITH (2001). Eine langsame, bzw. verzögerte Ausbildung der Nitritreduktase verursacht die NO_2^- - Anreicherung, SHI et al. (1999). Für Lachgas wurden diese Schwankungen nicht beobachtet. Die Ursache der unterschiedlich starken Produktion von NO_2^- und N_2O kann mit einfachen Korrelationen nicht beschrieben werden, siehe Tabelle A2-31 und A2-32 in Anlage 2, Blatt 2-40.

Kinetik des Nitratumsatzes

Am zeitlichen Verlauf von E(t) und D(t) konnten drei unterschiedliche Typen der Umsatzkinetik abgegrenzt werden, siehe Abschnitt 4.2.3.4. Diese sind gekennzeichnet durch einen über die Versuchsdauer nahezu konstanten N-Umsatz (Typ I), einen abnehmenden N-Umsatz (Typ II) und einen Anstieg von Elimination beziehungsweise Denitrifikation (Typ III). Die Ursachen dieser unterschiedlichen Entwicklungen können anhand der vorliegenden Ergebnisse nicht eindeutig geklärt werden. Es wird vermutet, dass (a) eine unterschiedlich schnelle Anpassung der Denitrifikanten, (b) unterschiedliche Gehalte an die verfügbaren Reduktionsmitteln, (c) unterschiedliche Milieubedingungen oder (d) eine Wechsel beziehungsweise eine Überlagerung von Prozessen, wie der chemo-lithotrophen oder chemo-organotrophen Denitrifikation, mögliche Erklärungen sind. Kenntnisse über die zeitliche Entwicklung des Wachstums und die Art der aktiven Bakterien, die hier nicht vorliegen, könnten vermutlich Erklärungslücken schließen.

An den nahezu linearen Verlauf von E(t) kann eine Reaktion 0. Ordnung mit vergleichsweise geringen Fehlern angepasst werden, siehe Blatt 2-32 in Anlage 2 Für Typ II, der durch einen parabolischen Verlauf von E(t) gekennzeichnet ist, kann die Anpassung einer Reaktion 1. Ordnung geeignet sein. Die für diese Anpassung angegebenen Fehler sind allerdings teilweise höher, als für eine Anpassung einer Reaktion 0. Ordnung, siehe Blatt 2-32 in Anlage 2. Für den Konzentrationsverlauf nach Typ III könnte die Anpassung gemäß der Monod-Kinetik vermutlich exaktere Ergebnisse liefern, als eine Anpassung 0. bzw. 1. Ordnung. Allerdings können, wie erwähnt, die dafür notwendigen Parameter zur Beschreibung der Kinetik nicht bestimmt werden, da für die durchgeführten Versuche keine Informationen zum Wachstum der Mikroorganismen vorliegen.

An den zeitlichen Verlauf der Konzentration von Nitrat und der denitrifikativen N-Produkte wurden Modelle nach einer Reaktion 0. Ordnung, 1. Ordnung und der Michaelis-Menten-Kinetik angepasst, siehe auch Blatt 2-31 in Anlage 2. Für Versuch W19 ist die Anpassung

einer MMK im Vergleich zur Anpassung mit einer Reaktion 0. oder 1. Ordnung, mit den geringsten Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Werten verbunden. Somit kann die Anwendung der MMK eine Alternative gegenüber einer Reaktionskinetik 0. oder 1. Ordnung darstellen.

In der Literatur liegen zahlreiche λ – Werte von Laborstudien vor, siehe beispielsweise KOROM (1992). Problematisch für einen Vergleich mit Literaturdaten sind jedoch die teilweise unterschiedlichen, zugrunde liegenden Milieubedingungen und Versuchsdauern. In Tabelle 4-8 werden Werte eigener Untersuchungen ausgewählten Literaturdaten gegenübergestellt. Verglichen mit Literaturdaten, sind die für Proben aus Sulingen und Wehnsen ermittelten λ-Werte plausibel. Einige Werte für Proben aus Wehnsen sind vergleichsweise sehr hoch. Die genannten Werte belegen das weite Spektrum an Größenordnungen von λ-Werten der Nitratelimination im Grundwasserleiter und unterstreichen die Notwendigkeit, für jedes Untersuchungsgebiet dieser Parameter beispielsweise für die numerische Transportmodellierung zu erfassen.

Tabelle 4-8: Gegenüberstellung von λ-Werten aus Laborversuchen

Untersuchungsgebiet oder Quellenangabe	Sediment	λ_o [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1} N$]	λ_1 [a^{-1}]
Wehnsen[1)]	Grob-/Mittelsand	0,002 - 0,096	0,03 - 7,4
	Feinsand	0,06 - 0,22	1,8 - 16,8
	Mergel-/Ton	0,5 - 1,5	40 - 135
Sulingen[1)]	Fein-/Mittelsand	0,01 - 0,02	0,18 - 0,5
Thülsfelde[2)]	Fein-/Mittelsand	0,07 - 0,2	1,2 - 13,9
Fuhrberger Feld, FRIND et al. (1990),	Sand		0,3 - 0,69
LIND (1983)[3)]	Sand	0,05 - 1,16	
RÖßNER (1996)[4)]	Sand	0,6 - 1,1	

[1)]Anlage 2, Blatt 2-32, [2)]von Daten aus PÄTSCH (2006) abgeleitet, siehe Tab. A4-2, Anlage 4, Blatt 4-3, [3)]Aquifer in Dänemark, zitiert in KOROM (1992), [4)]Aquifer bei Berlin

Ein Zusammenhang zwischen Initialphase der Prozesse, das heißt innerhalb einer Versuchsdauer von wenigen Tagen und dem langfristigen (t > 1a) Wirken der Prozesse ist erkennbar, siehe Abbildung 4-26. So korreliert beispielsweise die Produktion der Gase, $N_{2(Deni)}$ und N_2O, bereits für 2 d Versuchsdauer mit der Gasproduktion nach 365 d Versuchsdauer mit r_s = 0,73. Mit fortschreitender Versuchsdauer wird die Korrelation enger. Die Elimination des Nitrates korreliert mit r_s = 0,69 für eine Versuchsdauer von 7 d mit E(365d). Für die Abschätzung der langfristigen Elimination sollte demnach eine Mindestversuchsdauer von 7 d gewährleistet werden. Geringer sind die Korrelationen von D_i mit D(365d). Ursache dafür kann die teilweise starke Schwankung der Nitritkonzentration sein, siehe Tabelle A2-12, Anlage 2, Blatt 2 – 20 oder Abbildung 4-19.

Anteil biochemisch verfügbarer Reduktionsmittel

Der Zusammenhang zwischen eingangs vorhandenen totalen Gehalten an Reduktionsmitteln (TOC und Sulfid) und der Denitrifikation D(t) variiert innerhalb der Versuchsdauer, siehe

Tabelle A2-31 in Anlage 2, Blatt 2-40. Signifikante Korrelationen mit $r_s > 0,5$ werden für E(t) mit Sulfid-S gefunden. Dies kann ein Indiz dafür sein, dass die Denitrifikation weitestgehend chemo-lithotropher Natur ist. Anhand dieser Ergebnisse wird deutlich, dass der Gesamtgehalt an Reduktionsmitteln nicht zwangsläufig mit dem biologisch verfügbaren Anteil korrelieren muss. Damit wird belegt, dass D(t) speziell zu Versuchsbeginn nicht vorrangig vom Gesamtgehalt an Reduktionsmitteln bestimmt wird. Einen größeren Einfluss auf die Größenordnung von D(t) haben vermutlich der Rest-Sauerstoffgehalt in der Versuchslösung, aktive oder schnell aktivierbare Mikroorganismen und biologisch gut verfügbare Reduktionsmittel. Eine Abschätzung der Parameter E(t), D(t) oder λ–Werten aus dem Gehalt an Reduktionsmitteln ist deshalb mit großen Unsicherheiten behaftet, siehe Tabelle A2-27, Anlage 2, Blatt 2-33.

An einigen Versuchen kommt die Nitratelimination bereits zum Erliegen, wenn weniger als 5 % des Sulfidgehaltes verbraucht sind, siehe Abbildung 4-28 (leere Raute). An anderen Versuchen hingegen läuft weiterhin Denitrifikation ab, obwohl bereits 50 % des Sulfids umgesetzt worden sind. MEHRANFAR (2003) zeigt, dass zwischen 10 % und 50 % des Sulfidvorrats innerhalb von etwa 700 d verbraucht und somit biologisch verfügbar waren.

Die nach 570 d Versuchsdauer im Vergleich zum Versuchsbeginn höheren Werte des Sulfid-S, dargestellt in Abbildung 4-29, sind unplausibel. Die Ursachen für dieses Phänomen können nicht eindeutig bestimmt werden: Möglich sind zum einen Inhomogenitäten in der gemischten Sedimentprobe, so dass die analysierte Teilprobe vor Versuchsbeginn weniger Sulfid-S enthalten haben kann, als das Sediment, welches für den Batchversuch verwendet worden ist. Andererseits kann an der Sedimentprobe vor Versuchsbeginn, Sulfid im Zuge der Probenaufbereitung durch Luftsauerstoff oxidiert worden sein. Prinzipiell ist unter anoxischen Bedingungen auch eine Sulfidbildung infolge Sulfatreduktion möglich. An den vorliegenden Versuchen W 3, W9, W19 und W20 ist dies jedoch unwahrscheinlich, da eine Sulfatbildung (chemo-lithotrophe Denitrifikation) beobachtet wird.

4.3 Säulenversuche zum Nitratumsatz

4.3.1 Ziele

Säulenversuche reichen näher an die Verhältnisse im Aquifer heran als Batchversuche, da beim Säulenversuch die Strömung des Wassers und damit die ständige Zufuhr von Nitrat berücksichtigt wird. In der vorliegenden Arbeit wurden zahlreiche Batchversuche durchgeführt, da diese wesentlich kostengünstiger sind. Dabei wurde von der Hypothese ausgegangen, dass Batch- und Säulenversuche ähnliche Ergebnisse von der Nitratelimination liefern. Diese Hypothese wird in diesem Abschnitt geprüft. Das Ziel war es, durch einen Vergleich der Nitrat-Elimination jeweils von Batch- und Säulenversuch die Aussagekraft der Ergebnisse von Batchversuchen zu bewerten.

4.3.2 Methoden und Vorgehensweise

Drei Edelstahlsäulen von 50 cm Länge, einem Durchmesser von 75 mm und einem Volumen von 2,2 l wurden mit Gesteinsmaterial aus der Teufe der Filterbereiche der drei Messstellen 2113, 2122 und 2123 gefüllt. Verwendet wurde eine Mischprobe aus dem Material von jeweils 2 Bohrkernen. Das Durchströmen eines ungestörten Kernes ist maßgeblich von der resultierenden vertikalen hydraulischen Leitfähigkeit abhängig. Geringmächtige Toneinlage-

rungen haben somit entscheidenden Einfluss auf die Aufenthaltszeit des Wassers in der Säule und somit auf den N-Umsatz. Im Grundwasserleiter ist eine rein vertikale Strömung in solch geschichteten Bereichen im Gebiet Wehnsen unwahrscheinlich. Für einen Vergleich von Säulen- und Batchversuchen ist der Einfluss beispielsweise geringmächtiger Tonlinsen zu minimieren, so dass das Sediment gestört und mit Wasser gesättigt, d.h. bei einem Wasserüberstau von 1 - 3 cm, eingebaut wurde. Die Kenndaten der Säulenversuche sind in Anlage 2, Blatt 2-34 enthalten.

Parallelversuche sind nicht möglich, da die Menge an Gesteinsmaterial aus den Kernbohrungen beschränkt ist. Die Säulen werden mit N_2-begastem Grundwasser aufgesättigt und durchströmt. Die Säulen S2122 und S2123 werden im freien Gefälle als Durchlaufversuche durchströmt. Boyle - Marriottsche Flaschen dienen als Vorratsgefäß für die Testlösung. Um einen Zutritt von Sauerstoff zu vermeiden, wird die Öffnung der Gefäße mit einem gasdichten, mit N_2 gefüllten Sack verschlossen, so dass sich im Gasraum der Vorratsgefäße N_2 befindet. Mit freiem Gefälle konnte ein gleichmäßiges Durchströmen der Säule S2113 nicht erzielt werden. Deshalb wurde für Säule S2113 eine Pumpe eingesetzt.

Das Wasser wird mit 50 $mg \cdot l^{-1}$ $^{15}NO_3^-$, als $K^{15}NO_3$ beladen. Für alle Säulen wurden vor Versuchsbeginn Tracertests mit 5 $mg \cdot l^{-1}$ Br^- durchgeführt, um die Abstandsgeschwindigkeit v_a und die nutzbare Porosität n_e zu bestimmen. Einmal pro Monat wurden Gas- und Wasserproben entnommen und analysiert. Die Ergebnisse der Analysen sind in Anlage 2, Blatt 2-35 bis 2-37 enthalten. Die Analyse-Methoden sind in Anlage 2, Blatt 2-18 dargestellt. Die Elimination über die gesamte Versuchsdauer t wird wie folgt berechnet:

$$E(t) = \frac{\sum_{i=0}^{i=t} m_i(NO_3^-)_{Ablauf} - \sum_{i=0}^{i=t} m_i(NO_3^-)_{Zulauf}}{m_{Feststoff}} \qquad (4-16)$$

$m_i(NO_3^-)_{Zulauf} = \beta_{NO3\_Zulauf}[mg \cdot l^{-1}] \cdot \Delta V(t)\ [l]$

$m_i(NO_3^-)_{Ablauf} = \beta(t)_{NO3\_Ablauf}[mg \cdot l^{-1}] \cdot \Delta V(t)\ [l]$

Wobei $\Delta V(t)$ die Wassermenge ist, die seit der vorangegangenen Beprobung zum Zeitpunkt t_{i-1} bis zum Zeitpunkt t_i die Säule durchströmt hat.

$m_{Feststoff}$ … Feststoffmasse des Sedimentes in der Säule nach Tabelle A2-28 in Anlage 2, Blatt 2-34

Für β_{NO3_Zulauf} wird die gewichtete mittlere Zulaufkonzentration, siehe Tabelle A2-28 in Anlage 2, Blatt 2-34, angesetzt. Ähnlich wie nach Gleichung (4 – 2) für die Batchversuche, nimmt E(t) nach Gleichung (4 – 16) für die Säulenversuche bei stattfindender Nitratelimination negative Werte an. An den Verlauf von E(t) wird eine Reaktionskinetik 0. Ordnung entsprechend Gleichung (4 – 11) angepasst. Die Werte E(t) und λ, ermittelt mit Säulen- und Batchversuchen am Sediment gleicher Bohrkerne, werden einander gegenübergestellt und verglichen.

4.3.3 Ergebnisse

Exemplarisch werden hier die Resultate des Versuchs S2113 in Abbildung 4-30 dargestellt. Für die beiden anderen Versuche sind die Abbildungen A2-7 und A2-8 in Anlage 2, Blatt 2-38 und 2-39 enthalten.

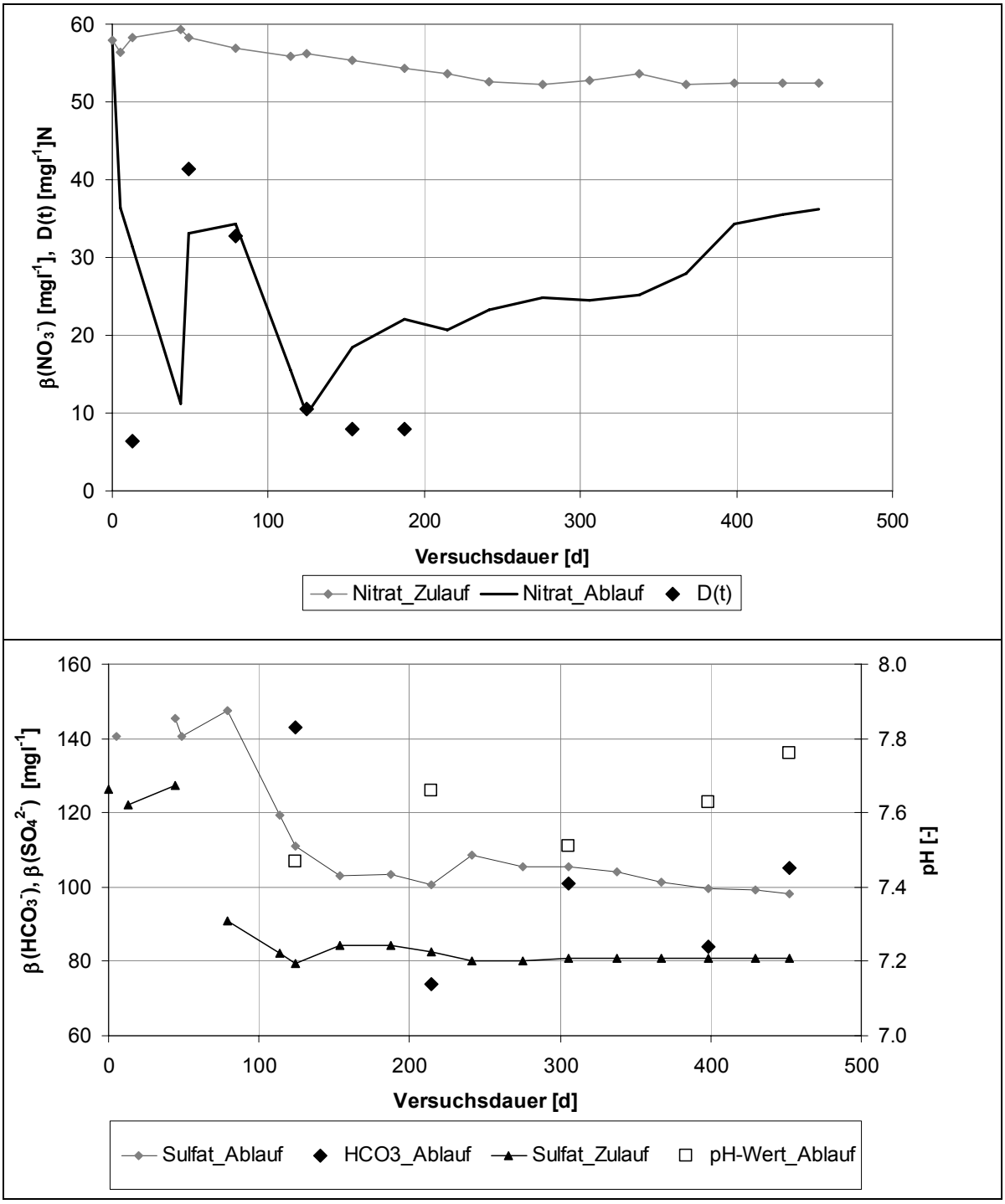


Abbildung 4-30: Zeitlicher Verlauf ausgewählter Konzentrationen am Säulenversuch S 2113

Charakterstisch für alle drei Versuche ist die schwankende Nitratkonzentration im Auslauf zu Versuchsbeginn, innerhalb der ersten 50 d bis 100 d. Bei keinem der drei Versuche wird das zugegebene Nitrat vollständig eliminiert. An den Versuchen S2113, Abbildung 4-30, und S2123, Anlage 2, Blatt 2-38, steigt die Nitratkonzentration im Säulenablauf nach etwa 150 d wieder deutlich an, so dass von einem Rückgang der Eliminationsleistung auszugehen ist. An allen 3 Säulenversuchen ist die Konzentration von Sulfat im Säulenablauf höher, als im Säulenzulauf.

In Abbildung 4-31, ist eine Gegenüberstellung von E(t) der Säulenversuche mit den Batchversuchen enthalten, die am Sediment korrespondierender Teufe durchgeführt worden sind.

In Tabelle 4-9 ist eine Gegenüberstellung von λ_o-Werten aus Batch- und Säulenversuchen enthalten. Für jedes Sediment der Säulenversuche liegen 2 korrespondierende Batchversuche vor. Die Größenordnung der λ_o-Werte stimmt für Batch- und Säulenversuche überein.

Tabelle 4-9: λ_o-Werte für Säulen- und Batchversuche

Säulenversuche			**Batchversuche[1)]**	
Bezeichnung	**λ_o-Wert[3)] [mg·kg^{-1}·d^{-1}] N**	**Gütekriterien[4)]**	**Bezeichnung**	**λ_o-Wert[2)] [mg·kg^{-1}·d^{-1}] N**
S2122	0,04	n = 25 MAE = 0,92 [mg·kg^{-1}·d^{-1}] N NRMS = 1,5 %	W1 W2	0,06 0,07
S2123	0,08	n = 22 MAE = 4,28 [mg·kg^{-1}·d^{-1}] N NRMS = 3,7 %	W3 W4	0,16 0,07
S2113	0,08	n = 19 MAE = 1,03 [mg·kg^{-1}·d^{-1}] N NRMS = 0,9 %	W7 W8	0,09 0,04

1) am Sediment gleicher Teufe wie die Säulenversuche
2) λ_o ist in Tabelle A2-26 in Anlage 2, Blatt 2-32 enthalten
3) Der λ_o-Wert wurde für die Funktion E(t), dargestellt in Abbildung 4-31 berechnet, wobei $E_o(t_o) = 0$.
4) Angegeben ist die Anzahl n der Messwerte, auf deren Basis λ_o ermittelt worden ist. MAE und NRMS sind die Fehler zwischen den Werten für λ_o nach Gleichung (4 – 11) und (4 – 16)

4.3.4 Diskussion und Bewertung

Der Konzentrationsverlauf des Nitrates an den Säulenversuchen, dargestellt in Abbildung 4-30 und Anlage 2, Blatt 2-38 und 2-39, ist bei ständiger Nitratzufuhr in dieser Art auch für den Grundwasserleiter zu vermuten. Auffällig ist der allmähliche Wiederanstieg der Nitratkonzentration im Auslauf an den Versuchen S2123 und S2113 nach etwa 100 d bis 200 d Versuchsdauer. Die Ursachen dafür sind in einem allmählichen Verbrauch der Reduktionsmittel und der damit verbundenen Verringerung der Kontaktflächen zwischen den festen Reduktionsmitteln und dem nitrathaltigem Wasser zu sehen. Dieser allmähliche Anstieg der Nitratkonzentration spiegelt sich in der sinkenden Elimination, zu erkennen an der abflachenden Kurve von E(t) in Abbildung 4-31 wider. Diese Abbildung zeigt ebenfalls, dass die Nitratelimination für Batch- und Säulenveruche eine jeweils ähnliche Größe aufweisen. Ausgenommen davon ist der Batchversuch W4, der eine deutlich höhere Nitratelimination als Batchversuch W3 und als der Säulenversuch S2123 zeigt. Als Ursache dafür wird eine heterogene Verteilung von verfügbaren Reduktionsmitteln vermutet. Die Konzentration des Sulfates im Säulenablauf, die gegenüber dem Säulenzulauf bei allen drei Versuchen deutlich erhöht ist, lässt auf den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation schließen, wie dies ebenfalls die Batchversuche zeigen.

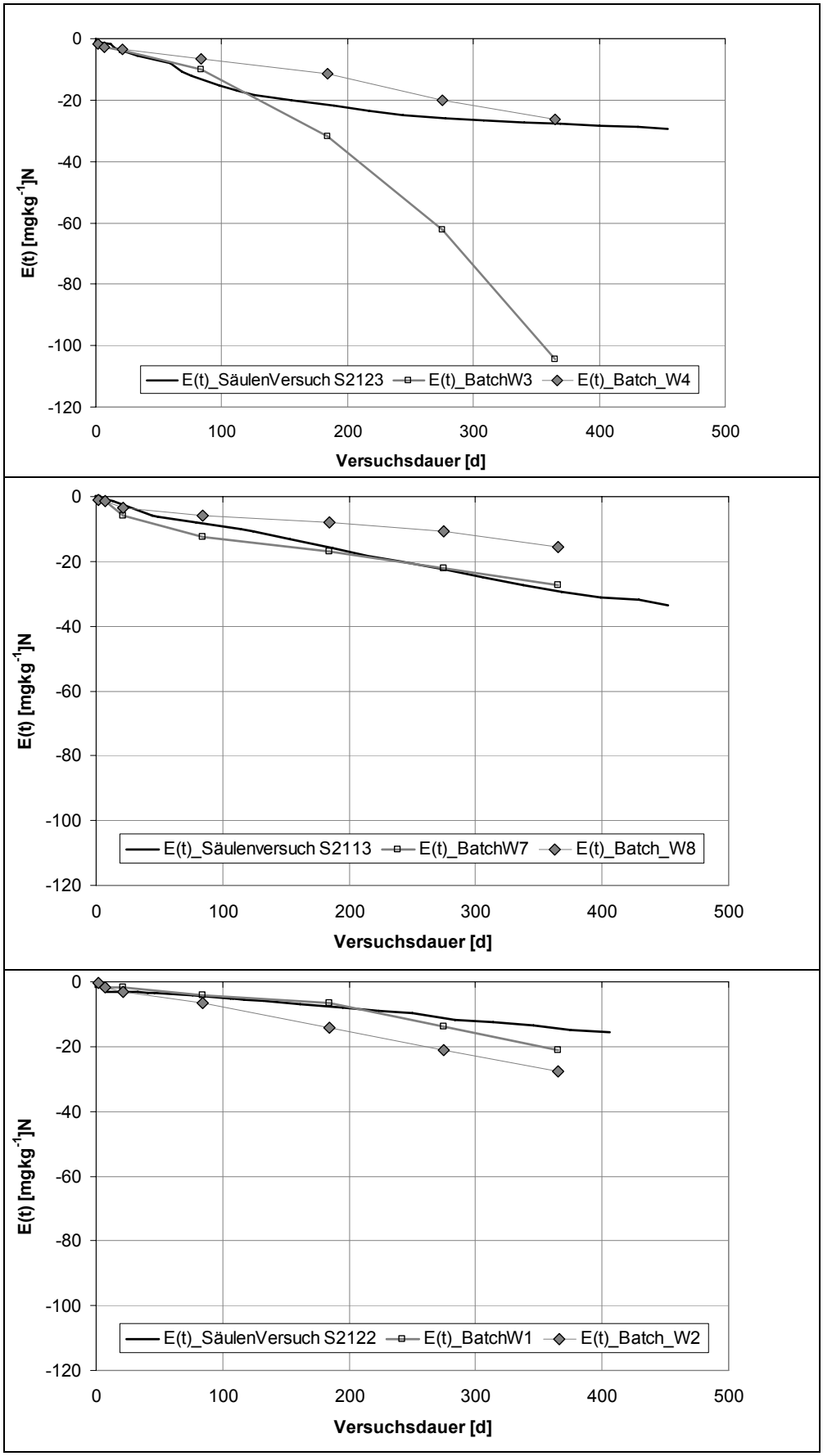


Abbildung 4-31: Zeitlicher Verlauf von E(t) für Säulen- und Batchversuche am Sediment korrespondierender Teufe

Sowohl die starken Konzentrationsschwankungen zu Versuchsbeginn, als auch der Anstieg der Nitratkonzentration nach etwa 100 d bis 200 d Versuchsdauer zeigen, dass eine Anpassung von Reaktionen 0. oder 1. Ordnung mit starken Unsicherheiten behaftet sein kann. In der Größenordnung des N-Umsatzes, beschrieben durch die Parameter E(t) und λ_o, stimmen Batch- und Säulenversuche überein. Für das Ziel der vorliegenden Arbeit, die Größenordnung und räumliche Verteilung des N-Umsatzes zu beschreiben, liefern die Batchversuche ausreichend sichere Ergebnisse.

Für die wasserwirtschaftliche Praxis können anhand dieser Ergebnisse für hydraulisch vergleichbare Grundwasserleiter folgende Schlüsse gezogen werden:

- Standortspezifische Untersuchungen zum Nitratumsatz sind notwendig, da auch augenscheinlich gleiche oder ähnliche Sedimente stark unterschiedliche Gehalte an Reduktionsmitteln und somit starke Unterschiede im Umfang der Denitrifikation aufweisen können.
- Gasmessungen sind nicht immer zwingend im vollen Umfange notwendig, da Denitrifikation und Elimination in der Größenordnung übereinstimmen.
- Für hydraulisch aktive Bereiche ($K \geq 10^{-6}$ m/s) ist eine Untersuchung der Sedimentproben auf Denitrifikation zur Abschätzung der Nitratelimination meist ausreichend, da dieser Prozess die Elimination quantitativ dominiert.
- Die Versuchsdauer für Batchversuche sollte mindestens 7 Tage betragen.
- Säulenversuche bezüglich Untersuchungen zur Nitratelimination sind für eine Abschätzung der Denitrifikation nicht zwingend notwendig.

5 Untersuchungen im Feld

5.1 Wasserbeschaffenheit und gelöste N-Gase

5.1.1 Ziele

Im vorangegangenen Kapitel wurden Ergebnisse von Untersuchungen zur Nitratelimination im Labor gezeigt. Für derartige Analysen und Versuche sind Sedimentproben aus Bohrungen notwendig, deren Gewinnung mit teilweise sehr hohen Kosten verbunden ist. In diesem Kapitel werden Verfahren angewendet, mit denen die Denitrifikation im Feld identifiziert und mit Einschränkung auch quantifiziert werden kann. Wie in den vorangegangenen Kapiteln mehrfach erwähnt, gilt die Denitrifikation meist als der quantitativ wirksamste Eliminationsprozess von Nitrat in norddeutschen, pleistozänen Aquiferen, siehe beispielsweise WALTHER et al. (2002), KÖLLE (2001). Deshalb sind die folgenden Methoden darauf ausgerichtet gewesen, den Ablauf der Denitrifikation zu identifizieren. Weitere mögliche Prozesse, wie die dissimilatorische Nitratreduktion zu Ammonium (DNRA) und die Sorption von Nitrat, siehe Kapitel 2, wurden deshalb nur am Rande berücksichtigt.

Ziel der Auswertung von Daten der Wassergüte war es herauszufinden, ob und in welchen Bereichen des Grundwasserleiters Denitrifikation aufgrund vorhandenen Nitrates und vorwiegend reduzierenden Milieubedingungen mit geringer Sauerstoffkonzentration (β_{O2} < 5 $mg \cdot l^{-1}$) potentiell qualitativ wirksam stattfinden kann. Weiterhin sollte die aktuelle hydrochemische Situation beschrieben werden, um Indizien für ablaufende Prozesse der Nitratelimination aufzudecken.

Ziele der im Folgenden vorgestellten Gas-Messungen von N_2O und des N_2/Ar-Verhältnisses, waren: (1) einen Nachweis für den Ablauf von Denitrifikation im Anstrom von Messstellen zu erbringen, (2) die Denitrifikation anhand des überschüssigen N_2 und N_2O zu quantifizieren, (3) über eine N-Summierung den Eintrag an NO_3^- und NH_4^+ zu bestimmen, (4) im Zusammenhang mit Daten der Wasserbeschaffenheit die Art der Denitrifikation zu bestimmen und (5) prüfen, ob Denitrifikation im tieferen Grundwasserleiter Lachgasgehalte freisetzt und somit als potentieller N_2O-Eminent bedeutsam ist.

5.1.2 Methoden und Vorgehensweise

5.1.2.1 Allgemeine Grundlagen

Die Auswirkung ablaufender Denitrifikation auf Parameter der Wasserbeschaffenheit ist in Abbildung 5-1 schematisch dargestellt. Betrachtet wird der Konzentrationsverlauf entlang einer Strombahn, die eine Zone mit vergleichsweise hohen Gehalten an verfügbaren Reduktionsmitteln und entsprechender Denitrifikation passiert. Dabei wird die Sauerstoffkonzentration bereits im oberflächennahen Grundwasser durch das Wirken heterotropher Mikroorganismen bei vorhandenem organischem Kohlenstoff verringert. Sauerstoffkonzentrationen im Grundwasser über 5 $mg \cdot l^{-1}$ behindern meist eine Reduzierung des Nitrates, siehe WALTHER (1999). Die Konzentration des Nitrates nimmt im Aquifer mit geringen Gehalten an Reduktionsmitteln geringfügig, bei der Passage von Arealen hoher Gehalte hingegen, deutlich ab. Je nach Art der Reduktionsmittel kann die Konzentration des Sulfates, als Produkt einer chemolithotrophen Denitrifikation oder die des Hydrogencarbonates in Abhängigkeit des pH-Wertes, als Produkt einer chemo-organotrophen Denitrifikation ansteigen. Beide Parameter liefern

lediglich Indizien, da ihre Konzentration auch durch andere Prozesse als die Denitrifikation verändert werden kann.

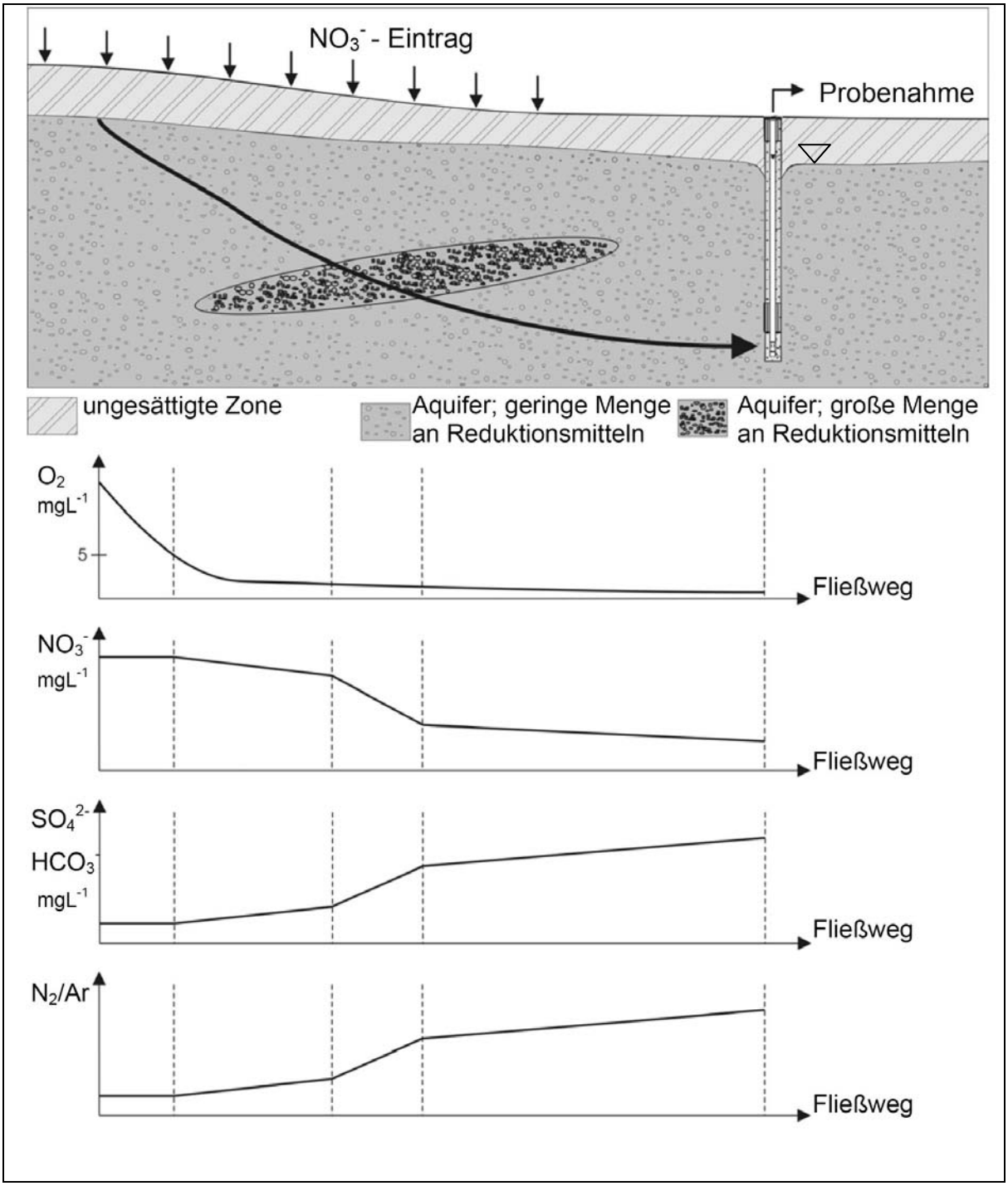


Abbildung 5-1: Schematischer Konzentrationsverlauf entlang des Fließweges ausgewählter Parameter bei stattfindender Denitrifikation

Einen Nachweis der Denitrifikation an Grundwasserproben kann die Bestimmung von Überschuss-N_2 (N_{2_exc} oder excess-N_2) erbringen. Die atmosphärischen Konzentrationen für N_2 und Ar sind etwa konstant. Sie betragen für N_2 78,08 Vol.% und für Ar 0,94 Vol.% in der Luft, siehe beispielsweise KENDALL & MCDONNELL (1998), so dass das N_2/Ar – Verhältnis in der Atmosphäre basierend auf diesen Gehalten 83,06 beträgt. Beide Gase werden in Abhängigkeit von Temperatur und Salzgehalt im Niederschlagswasser und damit im neu gebildeten

Grundwasser gelöst. Die Lösung der Gase kann mit dem Henry'schen Gesetz beschrieben werden, siehe STUTE & SCHLOSSER (2001):

$$c_i = \alpha_i(T, S') \cdot \frac{p_x}{p_o} \qquad (5-1)$$

Dabei ist: c_i die Konzentration des in Wasser gelösten Gases [mol·L^{-1}], p_x der Partialdruck des Gases auf der Grundwasseroberfläche [atm], p_o der Luftdruck [atm] und α_i der Bunsensche-Absorbtionskoeffizient [mol·l^{-1}] als Funktion von Temperatur (T) und Salzgehalt (S'). STUTE & SCHLOSSER (2001) zitieren verschiedene Autoren, die die Löslichkeit dieser Gase in Süß- und Salzwasser bestimmt haben. Demnach ist eine Erhöhung der Salzkonzentration um 1g·l^{-1} (NaCl) notwendig, um die Gaslöslichkeiten um 1 % zu reduzieren. Somit ist die Abhängigkeit der Gaslöslichkeit von der Salzkonzentration, für die hier betrachteten Grundwässer bedeutungslos.

Der Bunsen-Koeffizient α_i(T, S') wird entsprechend WEISS (1970) berechnet. Für verschiedene Temperaturen sind die Bunsenkoeffizienten und die daraus resultierenden Gleichgewichts-Konzentrationen von N_2 und Ar in Tabelle 5-1 angegeben. Für das Niederschlags- bzw. neu gebildete Grundwasser ergibt sich nach diesen Werten ein N_2/Ar-Verhältnis, je nach Temperatur, zwischen 37,1 und 38,6.

Tabelle 5-1: Gleichgewichts-Konzentrationen der Gase N_2 und Ar

Gas \ Temperatur	0°C	5°C	10°C	15°C	20°C	25°C
α_{N2}(T, S')	0,02374	0,02100	0,01881	0,01704	0,01559	0,01442
N_2 [mg·l^{-1}]	23,2	20,1	17,7	15,8	14,2	12,9
N_2 [µmol·l^{-1}]	827,0	718,6	632,1	562,6	506,2	460,2
α_{Ar}(T, S')	0,05363	0,04710	0,04184	0,03759	0,03412	0,03127
Ar [mg·l^{-1}]	0,89	0,77	0,67	0,59	0,53	0,48
Ar [µmol·l^{-1}]	22,3	19,2	16,8	14,8	13,2	11,9
N_2/Ar - Gleichgewicht	37,1	37,3	37,6	37,9	38,3	38,6

Entsteht durch Denitrifikation N_2, so erhöht sich das N_2/Ar-Verhältnis, da die Konzentration des Argons im Grundwasser nicht verändert wird. Ein, gegenüber dem temperaturabhängigen Gleichgewicht, erhöhtes N_2/Ar-Verhältnis im Grundwasser ist ein direkter Nachweis für den Ablauf einer Denitrifikation im Anstrombereich des beprobten Messpunktes. Eine N_2-Akkumulation in der ungesättigten Zone durch Denitrifikation ist wegen der hohen Gasdiffusivität normalerweise auszuschließen.

Für einen oberflächennahen Grundwasserleiter mit partieller Entgasung des N_2-Überschusses beschreiben BLICHER-MATTHIESEN et al. (1998) eine Korrektur des N_2-Überschuss-Wertes, die allerdings von einer konstanten gelösten Ar-Konzentration ausgeht.

Entlang einer Strombahn steigt mit zunehmender Tiefe unter dem Grundwasserspiegel der hydrostatische Druck und somit die Löslichkeit der Gase, so dass eine Entgasung des aus der Denitrifikation entstehenden N_2 unwahrscheinlich ist. In mikroskaligen Bereichen mit sehr starker biologischer Aktivität und demnach einer hohen Gasproduktion, könnte gebildetes Gas in so genannten Mikroblasen („microbubbles") auftreten, siehe GOLDENBERG et al.

(1989), so dass das produzierte Überschuss-Gas nicht vollständig in gelöster Form auftreten würde. Die Bildung von N_2-Blasen im tiefen Grundwasserleiter hat hier hypothetischen Charakter und wird nicht weiter berücksichtigt.

Lachgas (N_2O) entsteht als Nebenprodukt der Nitrifikation oder Zwischenprodukt der Denitrifikation und stammt meist zu 90% aus dem Boden. Da es teilweise in die Atmosphäre emittiert wird und Infrarotstrahlung absorbiert, trägt es mit zur Erwärmung der Erdatmosphäre bei, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998). In der Stratosphäre werden aus N_2O reaktive Stickstoffoxide gebildet, die Ozon zersetzten und somit die Ozonschicht schädigen, VAN GROENINGEN et al. (2005). Der Anteil des Lachgases an der gesamten Gasproduktion (N_2O und N_2) für die Denitrifikation ist unter anderem von folgenden Faktoren abhängig, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1998):

- pH – Wert; N_2O-Anteil steigt mit abnehmenden pH-Wert,
- Temperatur; maximaler N_2O-Anteil im Bereich von 4 bis 8°C.

Durch variable Milieubedingungen entlang der Fließbahn, beispielsweise in Arealen ohne verfügbare Reduktionsmittel, kann Nitrat - teilweise nur bis zum N_2O oder NO_2^- - reduziert werden. Da beide Substanzen immer Zwischenprodukte der Denitrifikation sind, treten teilweise nachweisbare N_2O-Konzentration innerhalb des reaktiven Bereiches auf. Entlang der Fließbahn wird das Lachgas aber meist weiter zu N_2 umgesetzt, was eine Abnahme der N_2O-Konzentration bewirkt. Wird an Grundwasserproben aus reduzierendem Milieu N_2O oder NO_2^- gemessen, so ist dies ein Nachweis, dass Denitrifikation stattfindet, Nitrat aber (noch) nicht vollständig zu N_2 umgesetzt wurde. Siehe dazu auch WELL et al. (2005).

Im Gegensatz zum Laborversuch (Kapitel 4) und teilweise auch zum Tracerversuch, siehe Abschnitt 5.2, wird bei der Gasmessung kein N-Umsatz durch Nitratzugabe provoziert. Vielmehr erfolgt eine Messung der unter natürlichen Bedingungen stattfindenden Denitrifikation. Eine weitere Möglichkeit, um den Ablauf von Denitrifikation im Anstrom eines Messpunktes nachzuweisen, ist die Messung der ^{15}N- und ^{18}O-Gehalte im Nitrat, da die Denitrifikation zu einer relativen Anreicherung der schweren Isotope ^{15}N und ^{18}O im Nitrat gegenüber ^{14}N und ^{16}O bzw. ^{17}O führt, MARIOTTI et al. (1988), COOK & HERCZEG (2001). Eine Isotopendiskriminierung dieser Art findet ebenfalls bei der DNRA statt, MCCREADY et al. (1983), OSTROM et al. (2002). Derartige Untersuchungen zur Isotopenzusammensetzung wurden im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt.

5.1.2.2 Vorgehensweise bei der Auswertung von Daten der Wassergüte

In einem ersten Schritt wird geprüft, ob im Grundwasserleiter Bereiche vornehmlich reduzierenden Milieus mit $\beta(O_2) < 5\ mg \cdot l^{-1}$ ausweisbar sind, in denen Denitrifikation quantitativ wirksam ablaufen kann. Weiterhin werden im Rahmen dieser Arbeit gemessene und die von den Wasserverbänden OOWV, WV SULINGER LAND und des WV Peine bereitgestellten Daten der Beschaffenheit auf Indizien für den Ablauf einer Denitrifikation geprüft. Indizien für die Art der Eliminationsprozesse sind in Tabelle 2-1 im Kapitel 2 aufgeführt. Beispielsweise sind hohe SO_4^{2-} - Konzentrationen bei verhältnismäßig niedrigen Nitratkonzentrationen Indizien für den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation, KÖLLE (2001). Auf den Ablauf einer chemo-organotrophen Denitrifikation können erhöhte HCO_3^- - Konzentrationen in Abhängigkeit des pH-Wertes hinweisen. Für sämtliche Wasseranalysen sind Fe_{gesamt} und Mn_{gesamt} bestimmt worden. Beide Parameter können deshalb nur als Indikatoren für den Gehalt an ge-

löstem Fe^{2+} und Mn^{2+} verwendet werden. Zur Interpretation von Daten der Wasserbeschaffenheit hinsichtlich des Ablaufs einer Denitrifikation haben sich folgende Methoden etabliert:

(1) **Vertikalprofile** der Parameter O_2, NO_3^-, SO_4^{2-}, HCO_3^-, Fe^{2+}, Mn^{2+}, pH-Wert, gelöster organischer Kohlenstoff und Redoxpotential:

Verschiedene Autoren haben solche oder ähnliche Auswertungen durchgeführt; unter anderem ROHMANN & SONTHEIMER (1985), POSTMA & BOESEN (1991), KETELSEN & WIDMOSER (2000), PEDERSEN et al. (1991), THAYALAKUMARAN et al. (2004) und SMITH et al. (1991). Als Bezugspunkt für Vertikalprofile ist der Grundwasserspiegel oder - bei gleichem Flurabstand - die Geländeoberkante zu wählen, da sich Zonierungen u.a. in Abhängigkeit der Fließlänge ausbilden. Da insbesondere im Untersuchungsgebiet Wehnsen der Grundwasserflurabstand regional verteilt Werte zwischen 2 m und 16 m annimmt, siehe WALTHER et al. (2005), wurden die Vertikalprofile auf den Grundwasserspiegel bezogen.

(2) **Zeitreihen** insbesondere der Parameter O_2, NO_3^-, SO_4^{2-}, HCO_3^-, Fe^{2+}, Mn^{2+}, pH-Wert und gelöster organischer Kohlenstoff:

Dabei deutet ein Anstieg der Gehalte von Reaktionsprodukten der Denitrifikation bei konstant bleibender, niedriger Nitratkonzentration auf N-Umsatzprozesse hin. Aus der Literatur ist zur Auswertung von Zeitreihen KETELSEN & WIDMOSER (2000) zu nennen. Für die 3 Untersuchungsgebiete war die Auswertung von Zeitreihen nicht geeignet: Die Landnutzung ist flächig sehr heterogen und der Nitrateintrag ins Grundwasser über die letzten Dekaden ist unbekannt.

(3) **Relationsdiagramme**, von Nitrat beispielsweise mit K^+, Mg^{2+}, Ca^{2+} oder Cl^-:

Diese Darstellung wird angewendet, wenn einzelne dieser Komponenten in landwirtschaftlich genutzten Gebieten aus der Düngung in den Untergrund und somit in das Grundwasser eingetragen werden. Ein Anstieg der Konzentrationen von K^+, Mg^{2+}, Ca^{2+} oder Cl^- bei gleich bleibender Nitratkonzentration deutet auf den Ablauf von Denitrifikation hin, siehe BÖHLKE (2002). Zu berücksichtigen ist allerdings, dass die Konzentration der genannten Ionen nicht ausschließlich durch den Eintrag oder N-Umsatzprozesse bestimmt werden.

(4) **Dreiecksdiagramme**, in denen die Ionenäquivalent-Konzentrationen des Nitrates, Sulfates und Hydrogencarbonates abgetragen werden und entsprechend der in RÖDELSBERGER et al. (1992) beschriebenen Häufung auf die Art ablaufender Prozesse geschlossen werden kann. Derartige Darstellungen ermöglichen es, Grundwasserleiter zu charakterisieren. Eine Quantifizierung der Denitrifikation ist nicht möglich.

5.1.2.3 Vorgehensweise bei der Gasprobenahme und Auswertung der Daten

Probenahme und Analyse

Die Grundwasserproben wurden mit einer MP1-Pumpe entnommen und unmittelbar luftblasenfrei in 115 ml-Glasflaschen (Vials) abgefüllt und mit einem Butylgummistopfen mit Bördelkappen verschlossen. In die Proben wurden am Department für Nutzpflanzwissenschaften, Abteilung Agrarpedologie der Universität Göttingen 8 ml Helium injiziert. Nach Gleichgewichtseinstellung wurden die Gase N_2 und Ar mittels Gaschromatographie bestimmt, siehe

auch BLICHER-MATTHIESEN et al. (1998). Auf einer gepackten Molekularsiebsäule wurden die Gase getrennt und mit einem Wärmeleitfähigkeitsdetektor detektiert. Die Probenahme für die N_2O-Messung erfolgte wie bei der N_2/Ar-Messung. Die Lachgasgehalte wurden mittels Gaschromatographie (Fractovap 4200 mit Elektronen-Einfang- und Thermo-Leitfähigkeits-Detektor) bestimmt.

Aufbereitung der Messergebnisse

Bestimmung des Überschuss-N_2

Aus dem N_2/Ar-Verhältnis kann das infolge Denitrifikation entstandene N_2, bezeichnet als Überschuss-N_2 oder auch excess-N_2, bestimmt werden:

$$N_{2\_exc} = \left[\left(\frac{N_2}{Ar} \right)_{gemessen} - \left(\frac{N_2}{Ar} \right)_{Gleichgewicht} \right] \cdot c_{Ar} \quad [\mu Mol \cdot l^{-1}] \qquad (5-2)$$

$(N_2/Ar)_{gemessen}$	…	N_2/Ar-Verhältnis, bestimmt aus den gemessenen Konzentrationen von N_2 und Ar
$(N_2/Ar)_{Gleichgewicht}$	…	Gleichgewichts-N_2/Ar-Verhältnis, temperaturabhängig
c_{Ar}	…	gemessene Ar-Konzentration [$\mu Mol \cdot l^{-1}$]

Variieren mit dem N_2/Ar-Verhältnis weitere Parameter der Wasserbeschaffenheit, wie beispielsweise Sulfat oder Hydrogencarbonat, so kann auf die Art der ablaufenden Denitrifikation geschlossen werden. Es wird der Korrelationskoeffizient nach Spearman (r_s) von N_2/Ar- mit Parametern der Wassergüte für die Gebiete Wehnsen und Thülsfelde berechnet. Die Anzahl der Datenpaare aus dem Gebiet Sulingen ist dafür zu gering.

Quantifizierung der Denitrifikation

Die Menge an Nitrat-N, die durch Denitrifikation im Grundwasserleiter umgesetzt worden ist wird für ein reduzierendes Milieu folgendermaßen bestimmt:

$$D = \beta(N_{2\_exc}\text{-}N) + \beta(N_2O\text{-}N) + \beta(NO_2^-\text{-}N) \qquad (5-3)$$

D	…	durch Denitrifikation umgesetzte Nitratkonzentration [$mg \cdot l^{-1}$]N
$\beta(N_{2\_exc}\text{-}N)$	…	Konzentration des Überschuss-N_2 [$mg \cdot l^{-1}$]N
$\beta(N_2O\text{-}N)$	…	Konzentration des Lachgases [$mg \cdot l^{-1}$]N
$\beta(NO_2^-\text{-}N)$	…	Konzentration des Nitrits [$mg \cdot l^{-1}$]N

Da Nitrit ebenfalls als Zwischenprodukt der Nitrifikation entsteht, ist diese Gleichung nur für reduzierendes Milieu gültig, das heißt, wenn Ammonium vollständig zu Nitrat oxidiert worden ist. Ist keine Nitrit nachweisbar, so kann die Konzentration des entlang einer Strombahn bis zum Filterbereich des beprobten Messstelle denitrifikativ umgesetzten Nitrats aus der Überschuß-N_2- und der Lachgaskonzentration bestimmt werden.

Abschätzung eines Umsatzkennwertes λ_o

Um die Denitrifikation im Grundwasserleiter zu bewerten, bzw. um die Werte einzelner Messstellen zu vergleichen, ist die Fließstrecke und –zeit zu berücksichtigen. Dazu wird das Grundwasseralter (t_a) zur Bestimmung der Fließdauer im Aquifer herangezogen. Für eine

Strombahn kann ein integraler Wert des N-Umsatzes 0. Ordnung (λ_o) aus D und t_a abgeschätzt werden:

$$\lambda_o = -\frac{D}{t_a} \; [mg \cdot l^{-1} \cdot a^{-1}] \qquad (5 - 4)$$

Voraussetzung ist außerdem, dass Nitrat entlang der gesamten Fließstrecke vorhanden ist und sowohl der Fließweg von der Grundwasseroberfläche bis zum Filterbereich der Messstelle, als auch t_a bekannt sind. Die berechneten Werte können Laborversuche zur Bestimmung der Kinetik des N-Umsatzes keinesfalls ersetzen, da eine Reaktion 0. Ordnung vorausgesetzt wird, die nicht zwangsläufig gegeben sein muss. Weiterhin ist die Bestimmung von t_a je nach angewendeter Methode mit Unsicherheiten behaftet. Vergleichbar mit Werten aus Laborversuchen sind diese λ_o-Werte nur dann, wenn ein über die gesamte Fließstrecke gleichmäßiger Nitratumsatz stattfindet. Das kann nur bei einer gleichmäßigen Verteilung von verfügbaren Reduktionsmitteln im Aquifer und gleichen Milieubedingungen gewährleistet werden.

<u>Abschätzung des Nitrat- und Ammoniumeintrages</u>

Die Kenntnis des Nitrateintrages in das Grundwasser erlaubt mit Einschränkungen beispielsweise die Erfolgskontrolle von Landnutzungsänderungen und stellt eine wichtige Eingangsgröße für numerische Transportmodelle dar. Können neben dem Überschuss-N_2 auch die Konzentrationen an NH_4^+, N_2O und NO_2^- im Grundwasser bestimmt werden, so ist gegebenenfalls eine überschlägige Bestimmung des N-Eintrages möglich. Allerdings muss dafür das Einzugsgebiet der Filterstrecke der beprobten Messstelle und die Länge und Lage der Strombahn abgeschätzt werden können, was in der Praxis mit großen Unsicherheiten behaftet ist. Die Einzugsbereiche der Filterstrecken von Messstellen und der Verlauf der Strombahn können beispielsweise mit numerischen Transportmodellen abgegrenzt werden. Die Ergebnisse einer Modellrechnung sind beispielsweise mit Altersdatierungen, die für das Grundwasser einer beprobten Messstelle durchgeführt werden sollten, zu prüfen. Unsicherheiten von Modellen und Altersdatierungen schränken, ebenso wie mögliche Fehler bei der Gasprobenahme, die Aussagekraft des Ergebnisses der folgenden Berechnung (5 - 5) ein. Diese Ergebnisse sind deshalb immer mit Unsicherheiten behaftet und in jedem Fall kritisch zu hinterfragen. Die Summe der Konzentrationen $\beta(N_{2\_exc}\text{-}N)$, $\beta(N_2O\text{-}N)$, $\beta(NO_2^-\text{-}N)$, $\beta(NO_3^-\text{-}N)$ und $(NH_4^+\text{-}N)$ ergibt eine Abschätzung des Eintrags von Ammonium- und Nitratstickstoff (N_{input}) zum Zeitpunkt der Grundwasserneubildung ($t\text{-}t_a$):

$$[NO_3^- - N + NH_4^+ - N]_{input}(t - t_a) =$$
$$[NO_3^- - N + NH_4^+ - N + N_{2\_exc} - N + N_2O - N + NO_2^- - N]_{gemessen}(t) \qquad (5-5)$$

($t\text{-}t_a$) … Zeitpunkt der Grundwasserneubildung, t …Zeitpunkt der Messung, t_a… Grundwasseralter [a]

Es wird angenommen, dass entlang der Stromröhre keine Durchmischung stattfindet. Es kann anhand dieser Gleichung nicht differenziert werden, wie viel Stickstoff als Nitrat und wie viel als Ammonium, welches unter oxidierenden Milieubedingungen zu Nitrat oxidiert wurde, in den Grundwasserleiter eingetragen wurde. Ein Aufkonzentrieren des Nitrates bzw. der Gase im wasserungesättigten Bereich oder im Kapillarsaum infolge zeitlich variierender Grundwasserneubildung bleibt unberücksichtigt bzw. wird als entsprechend hoher Eintrag bewertet. Die Plausibilität des Ergebnisses kann geprüft werden, sofern die Landnutzung des jeweiligen Anstrombereiches für den Zeitpunkt der Grundwasserneubildung bekannt ist.

N_2/Ar – Verhältnis an unterschiedlichen Zeitpunkten

Werden für unterschiedliche Zeitpunkte gleiche Milieubedingungen, Aufenthaltsdauern, Strömungsrichtung und –geschwindigkeit, sowie ein ständiger Nitratüberschuss im Grundwasserleiter vorausgesetzt, so kann eine Veränderung des N_2/Ar- Verhältnisses durch Veränderung der Denitrifikation oder des Nitrateintrages verursacht worden sein. Zur Prüfung, ob eine Veränderung erfolgt, wurden an 8 Messstellen im Gebiet Wehnsen die Nitrat- und Lachgaskonzentration, sowie das N_2/Ar-Verhältnis an zwei Zeitpunkten im Abstand von 16 Monaten bestimmt, siehe Abschnitt 5.1.3.2.

5.1.3 Ergebnisse

5.1.3.1 Ergebnisse der Auswertung der Wassergüte

Wassergewinnungsgebiet Wehnsen

Die Abbildung A3-3, Anlage 3, Blatt 3-6 zeigt Tiefenprofile von Parametern der Grundwasserbeschaffenheit einer Messkampagne vom Juni 2004 im Anstrom der Brunnen F5 und F6 des Wasserwerkes Wehnsen. Die Daten sind in Tabelle A3-1 in Anlage 3, Blatt 3-1 und 3-2 enthalten. Es wird deutlich, dass der Grenzwert für Nitrat von 50 $mg \cdot l^{-1}$ sowohl im oberen Grundwasserleiter, bis etwa 15 m unter Grundwasserspiegel, teilweise bereits auch im Hauptgrundwasserleiter, tiefer als 20 m unter Druckspiegel, deutlich überschritten wird.

Im oberen Grundwasserleiter wird an 8 der insgesamt 11 beprobten Messstellen eine Sauerstoffkonzentration von etwa 10 $mg \cdot l^{-1}$ bestimmt. Relationsdiagramme der Konzentrationen von HCO_3^- und SO_4^{2-} mit der Nitratkonzentration sind in Anlage 3, Abbildung A3-1, Blatt 3-4 enthalten. An zwei Messstellen im Hauptgrundwasserleiter werden sehr hohe HCO_3^- - Konzentrationen (>200 $mg \cdot l^{-1}$) gemessen, die bei gleichzeitig geringen Nitratkonzentrationen auf den Ablauf einer chemo-organotrophen Denitrifikation schließen lassen. Für Sulfat und somit für den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation sind derartige Signale im Relationsdiagramm weniger deutlich. Die Konzentrationen des Gehaltes an gelöstem organischem Kohlenstoff (DOC) liegen bei der Messkampagne vom Oktober 2005 zwischen 0,6 $mg \cdot l^{-1}$ und 3 $mg \cdot l^{-1}$, siehe Tabelle A3-1, in Anlage 3, Blatt 3-2.

Eine Darstellung der Konzentrationen von Nitrat, Sulfat und Hydrogencarbonat im Dreiecksdiagramm und der entsprechenden Interpretation nach RÖDELSBERGER et al. (1992) enthält Abbildung A3-2 in Anlage 3, Blatt 3-5. Danach läuft im Grundwasserleiter Wehnsen sowohl chemo-lithotrophe, als auch chemo-organotrophe Denitrifikation ab. Ammoniumgehalte > 0,0125 $mg \cdot l^{-1}$ wurden im Grundwasser im Zuge der Messkampagne im Oktober 2005 nicht nachgewiesen.

Wassergewinnungsgebiet Sulingen

Für das Einzugsgebiet des Wasserwerkes Sulingen sind ausgewählte Beschaffenheitsdaten zweier Standorte, die mit Mehrfach-Messstellen ausgestattet sind, in Anlage 3, Tabelle A3-2, Blatt 3-7 und Abbildung A3-6, Blatt 3-11 enthalten. Bis etwa 15 m unter Grundwasserspiegel übersteigt die Sauerstoffkonzentration den Wert von 5 $mg \cdot l^{-1}$. Für diese Bereiche ist auch eine deutliche Überschreitung des Grenzwertes von Nitrat festzustellen. Für die Art der Denitrifikation liefern die Parameter der Wasserbeschaffenheit keine eindeutigen Indizien.

Wassergewinnungsgebiet Thülsfelde

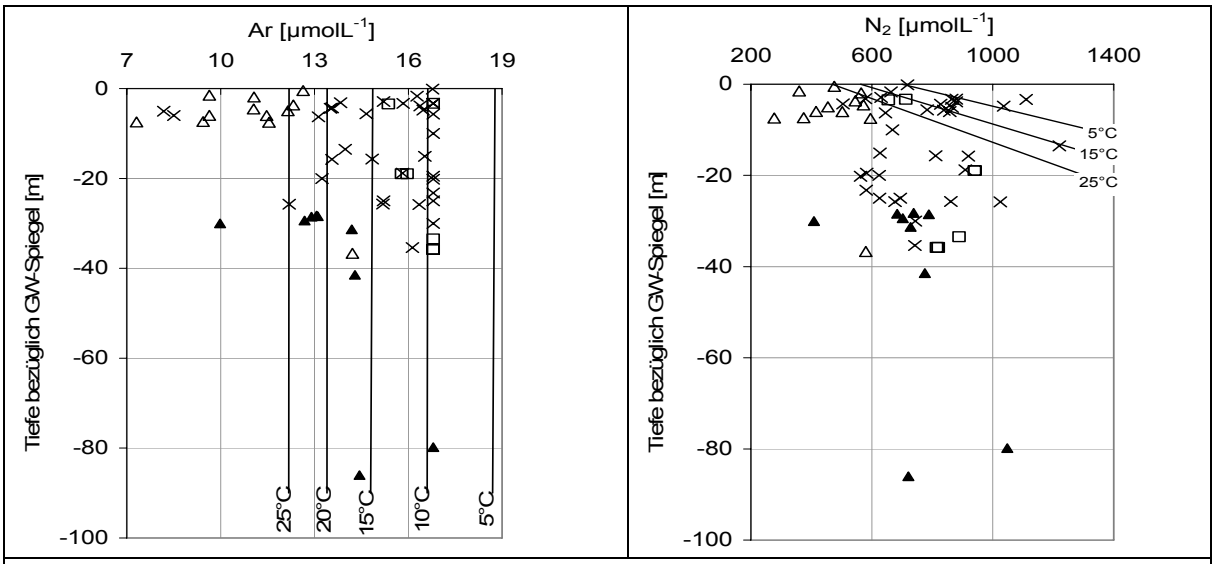
Für die Fassung A des Wassergewinnungsgebietes Thühlsfelde sind Ergebnisse umfangreicher Untersuchungen in PÄTSCH (2006) enthalten. Daten ausgewählter Messstellen sämtlicher Fassungen in Thülsfelde sind in Tabelle A3-3 in Anlage 3, Blatt 3-8 enthalten. In Abbildung A3-4, Blatt 3-6 dieser Anlage sind Tiefenprofile ausgewählter Parameter für den Bereich der Fassung A des Wasserwerkes Thülsfelde dargestellt, weitere Daten sind beispielsweise in WALTHER et al. (2005) enthalten.

Grenzwertüberschreitungen der Nitratkonzentration treten oberflächennah, bis maximal 10 m unter Grundwasserspiegel auf. In den Bereichen tiefer als 10 m unter Grundwasserspiegel ist die O_2-Konzentration $\beta_{O2} < 5\ mg \cdot l^{-1}$. Vergleichsweise hohe Sulfatgehalte in einer Tiefe von 15 m unter Grundwasserspiegel deuten auf den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation hin.

5.1.3.2 Ergebnisse der Gasmessungen

Messungen von N_2 und Ar

In Abbildung 5-2 sind die gemessenen Gehalte von N_2 und Ar in Abhängigkeit der der Beprobungsteufe für alle drei Untersuchungsgebiete[1] dargestellt. Dabei wird deutlich, dass an einigen Proben eine geringere Ar-Konzentration gemessen wurde, als es der Gleichgewichtskonzentration nach Tabelle 5-1 entspricht. Die Daten sind in Anlage 3, Blatt 3-2, Blatt 3-7 und Blatt 3-9 enthalten. Die Ergebnisse der N_2-/ Ar-Messungen für die Grundwasserleiter in Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde zeigt Abbildung 5-3. Es wird deutlich, dass ein Großteil der beprobten Messstellen einen quantifizierbaren Anteil Überschuss-N_2 aufweißen.



Legende: Linien zeigen die temperaturabhängige Sättigung für Ar und die temperatur- und tiefenabhängige Sättigung für N_2 (bei einer Zunahme des hydrostatischen Drucks um 1atm pro 10m Wassersäule) an

× Thülsfelde □ Sulingen △ Wehnsen_oGWL ▲ Wehnsen_uGWL

Abbildung 5-2: Gemessene Ar- und N_2-Konzentrationen

[1] Thülsfelde: Untersuchungen in den Fassungen A bis F

Ein erhöhtes N_2/Ar-Verhältnis wird anhand der Vertikalprofile in Abbildung A3-5 in Anlage 3, Blatt 3-10 mindestens bis in eine Tiefe von ca. 40 m unter Grundwasserspiegel in allen drei Gebieten festgestellt. Für Wehnsen liegen Werte eines Standortes aus etwa 80 m Tiefe vor, an denen offensichtlich ebenfalls Überschuss-N_2 gemessen wurde.

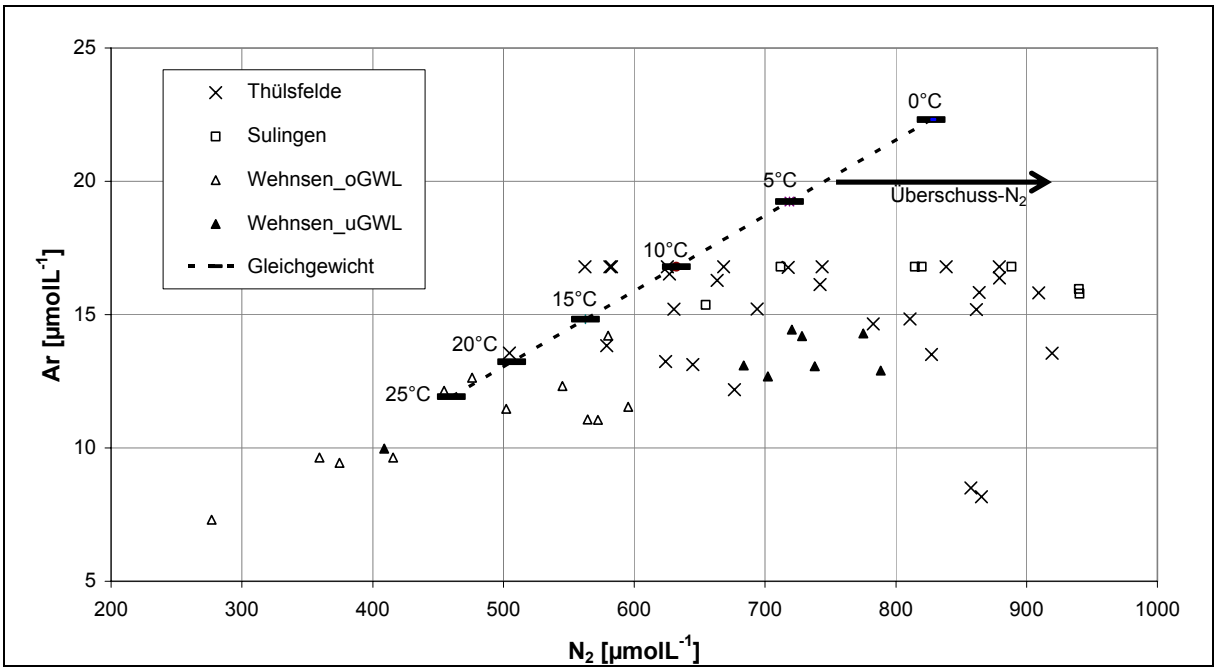


Abbildung 5-3: Verhältnis der gemessenen Ar- und N_2-Konzentrationen

Zusammenhang zwischen N_2/Ar-Verhältnis und ausgewählten Parametern

Korrelationskoeffizienten r_s für das N_2/Ar-Verhältnis mit ausgewählten Güteparametern sind für die Gebiete Thülsfelde und Wehnsen getrennt in Tabelle A3-5 im Anhang 3, Blatt 3-12 enthalten. Für beide Gebiete ist jeweils ein negativer Zusammenhang zwischen N_2/Ar und NO_3^- bzw. O_2 mit signifikanten Korrelationen belegt. Die Abbildung 5-4 zeigt das N_2/Ar-Verhältnis und die Konzentration gelösten Sauerstoffs. Diese Darstellung bestätigt, dass ein deutlich erhöhtes N_2/Ar-Verhältnis, beispielsweise $N_2/Ar > 50$, meist nur für $\beta_{O2} < 4$ mg·l^{-1} anzutreffen ist.

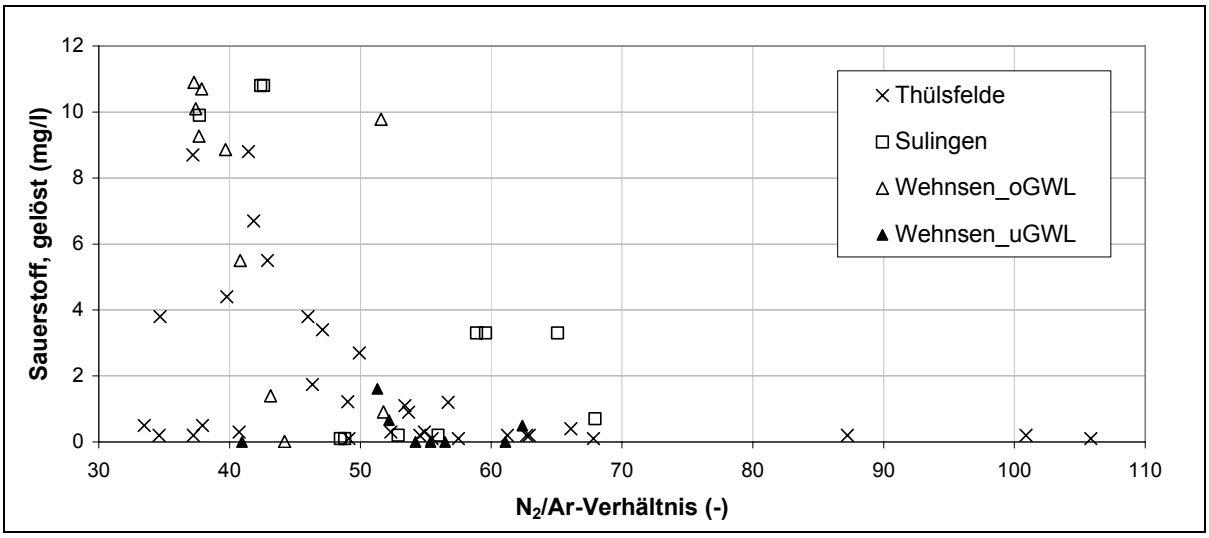


Abbildung 5-4: N_2/Ar und Konzentration des gelösten Sauerstoffs

Deutliche Zusammenhänge zwischen N-Umsatz, ausgedrückt durch N_2/Ar, und Reaktionsprodukten der chemo-lithotrophen Denitrifikation werden für die Messungen in Thülsfelde durch die signifikanten Korrelationen r_s = 0.72 (N_2/Ar und SO_4^{2-}), r_s = 0.56 (N_2/Ar und $Mn_{ges.}$ und r_s = 0.45 (N_2/Ar und $Fe_{ges.}$) belegt.

N_2O – Messungen

N_2O wurde im Anstrom einiger Messstellen in Thülsfelde und Wehnsen nachgewiesen. Die Werte sind in den Tabellen im Anhang 3, Tabelle A3-1 und A3-3a, Blatt 3-2 und 3-9 enthalten. Aus dem Gebiet Sulingen liegen keine Messungen vor.

Im oberen Grundwasserleiter von Wehnsen liegen die mittleren Gehalte bei 79,6 $\mu g \cdot l^{-1}$ N_2O, im HGWL bei 217,1 $\mu g \cdot l^{-1}$. Der Mittelwert aus den untersuchten Messstellen des Gebietes Thühlsfelde liegt bei 120,2 $\mu g \cdot l^{-1}$ N_2O. Für einen Nitratumsatz von D > 10 $mg \cdot l^{-1}$N, bestimmt aus dem N_2/Ar-Verhältnis, dem Nitrit- und Lachgasgehalt, zeigt die Abbildung 5-5, dass der Lachgasanteil <1% des gesamten denitrifikativen N-Umsatzes beträgt. Bei starker Denitrifikation, läuft diese weitestgehend vollständig ab, so dass die Konzentration des Zwischenproduktes Lachgas ausgesprochen gering ist.

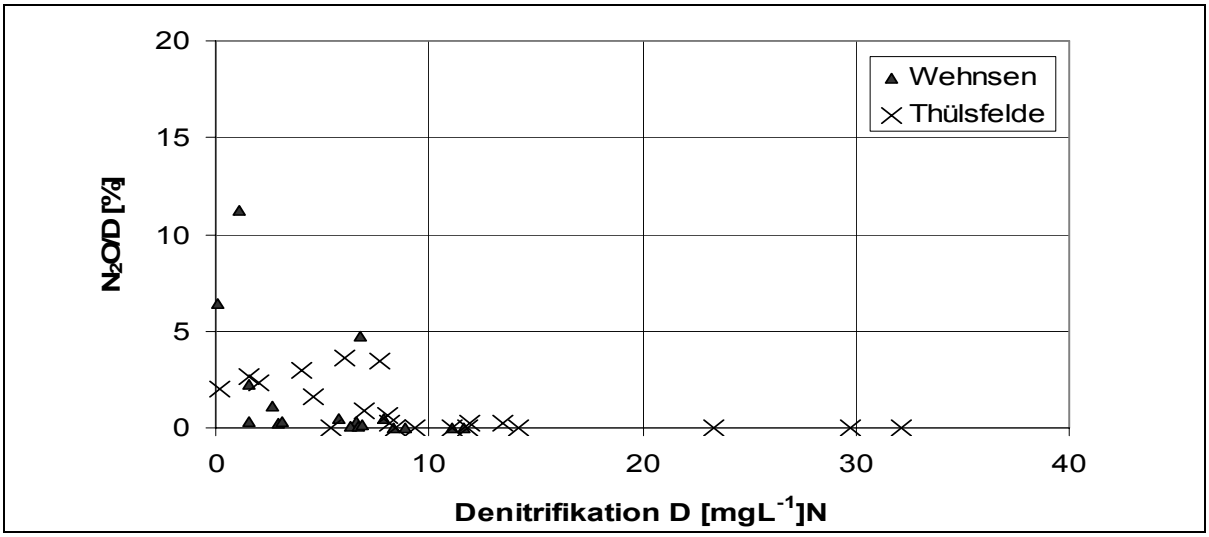


Abbildung 5-5: Anteil der Lachgasproduktion an der Denitrifikation

Die Tabelle A3-6, Blatt 3-12 im Anhang 3 enthält Korrelationskoeffizienten (r_s) zwischen N_2O-Konzentration und ausgewählten Parametern der Wasserbeschaffenheit. Signifikante Koeffizienten mit r_s > 0.5 werden für N_2O und NO_3^- für beide Gebiete berechnet und signalisieren einen positiven Zusammenhang. Das heißt, es werden relativ hohe N_2O-Gehalte im Anstrom einer Messstelle bestimmt, wenn Nitrat nicht vollständig umgesetzt worden ist.

Bestimmung von Überschuss-N_2, D und λ_o

Aus den gemessenen Gaskonzentrationen von N_2 und Ar wurden entsprechend der Gleichung (5 – 2) die Gehalte an Überschuss-N_2 berechnet. Die bestimmten Überschuss-N_2-Konzentrationen betragen für Wehnsen bis zu 11,6 $mg \cdot l^{-1}$N, siehe Blatt 3-2 in Anlage 3, für Sulingen bis zu 14,2 $mg \cdot l^{-1}$N, siehe Blatt 3-7 in Anlage 3 und für Thülsfelde bis maximal 32,1 $mg \cdot l^{-1}$N (Blatt 3-9 in Anlage 3).

Die Menge an Nitrat-N, die durch Denitrifikation im Grundwasserleiter umgesetzt worden ist, wird wie bei den Laborversuchen mit D bezeichnet und nach Gleichung (5 – 3) bestimmt.

Werte für ausgewählte Messstellen sind in Tabelle A3-4 im Anhang 3, Blatt 3-11 für Wehnsen und Thülsfelde angegeben. An den meisten Messstellen in den drei Untersuchungsgebieten ist keine Nitrit nachweisbar. Somit kann die Konzentration des entlang einer Strombahn bis zum Filterbereich des beprobten Messstelle denitrifikativ umgesetzten Nitrats aus der Überschuß-N_2- und der N_2O-Konzentration bestimmt werden.

Die Tabelle A3-4 im Anhang 3, Blatt 3-11 enthält ebenfalls die nach Gleichung (5-4) berechneten Kennwerte λ_o für eine Reaktion 0. Ordnung. Das dafür notwendige Grundwasseralter wurde aus Altersdatierungen, MEON et al. (2005), WALTHER et al. (2002) und OSTER (2001) entnommen. Die angegebenen Werte für λ_o liegen für Wehnsen im Bereich von 0,04 bis 1,36 $mg \cdot l^{-1} \cdot a^{-1}$ NO_3^- und für Thülsfelde zwischen 0,01 und 2,79 $mg \cdot l^{-1} \cdot a^{-1}$ NO_3^-.

Abschätzung des Nitrateintrages ins Grundwasser

Die Größenordnung stellt einen wesentlichen Baustein für die Erfolgskontrolle grundwasserschonender Landbewirtschaftung dar. Für die drei Gebiete sind diese Werte für den Nitrateintrag, basierend auf den vorhandenen Daten (unter Anwendung von Gleichung (5 – 5) in Abbildung 5-6, Abbildung 5-7 und Abbildung A3-7 in Anlage 3, Blatt 3-13 dargestellt. Sind Altersdatierungen durchgeführt worden, so ist der Zeitpunkt der daraus ableitbaren Grundwasserneubildung als Jahreszahl angegeben. Es sei an dieser Stelle nochmals auf die eingeschränkte Aussagekraft dieser Ergebnisse hingewiesen, die im Abschnitt 5.1.2.3 bereits dargelegt worden ist.

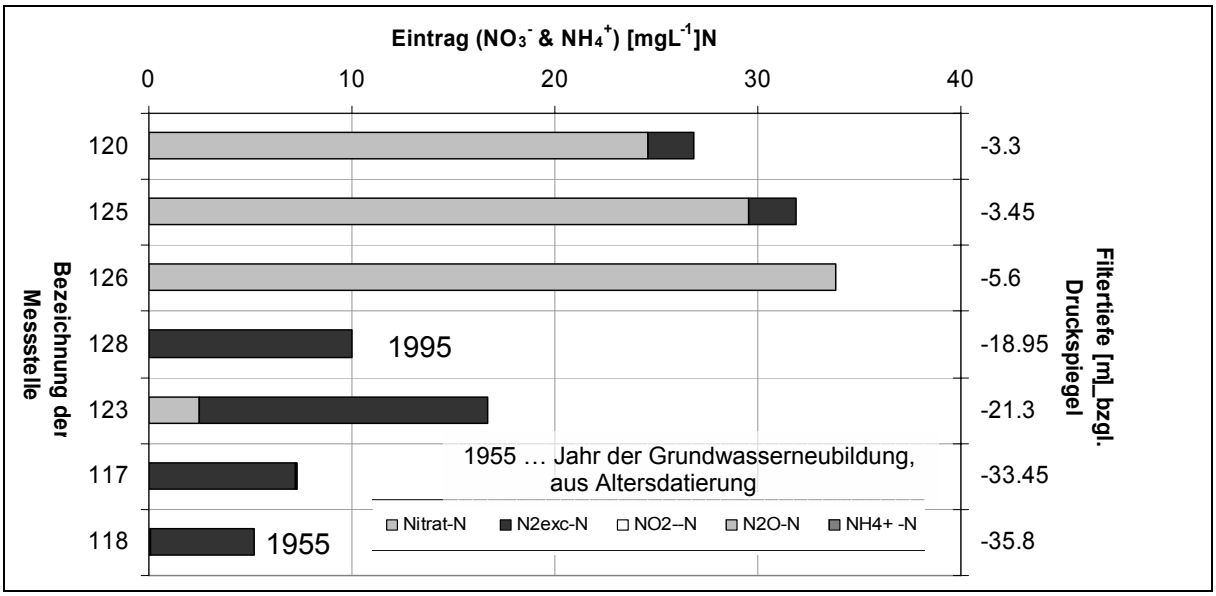


Abbildung 5-6: Schätzung von Nitrat- und Ammoniumeintrag ins Grundwasser, Sulingen

Für die Gebiete Thülsfelde und den oberen Grundwasserleiter in Wehnsen wurden anhand von Gleichplänen der Einzugsbereich der jeweiligen Messstelle und die damit verbundene heutige Landnutzung abgeschätzt und angegeben. Im Gebiet Sulingen wird der Anstrombereich der gezeigten Messstellen landwirtschaftlich genutzt. Zwischen den berechneten N-Einträgen und der heutigen Landnutzung kann kein eindeutiger Zusammenhang festgestellt werden. Die Maxima der Nitrat- und Ammoniumeinträge liegen für die drei Gebiete im Bereich von 30 bis 40 $mg \cdot l^{-1}N$ (130 bis 180 $mg \cdot l^{-1}NO_3^-$) und entsprechen somit Literaturwerten, WALTHER (1999). Am Großteil der im tieferen Grundwasserleiter verfilterten Messstellen ist

Nitrat häufig zu N_2 umgesetzt worden. Die Anteile der N-Spezies N_2O, NH_4^+ und NO_2^- sind quantitativ nahezu bedeutungslos.

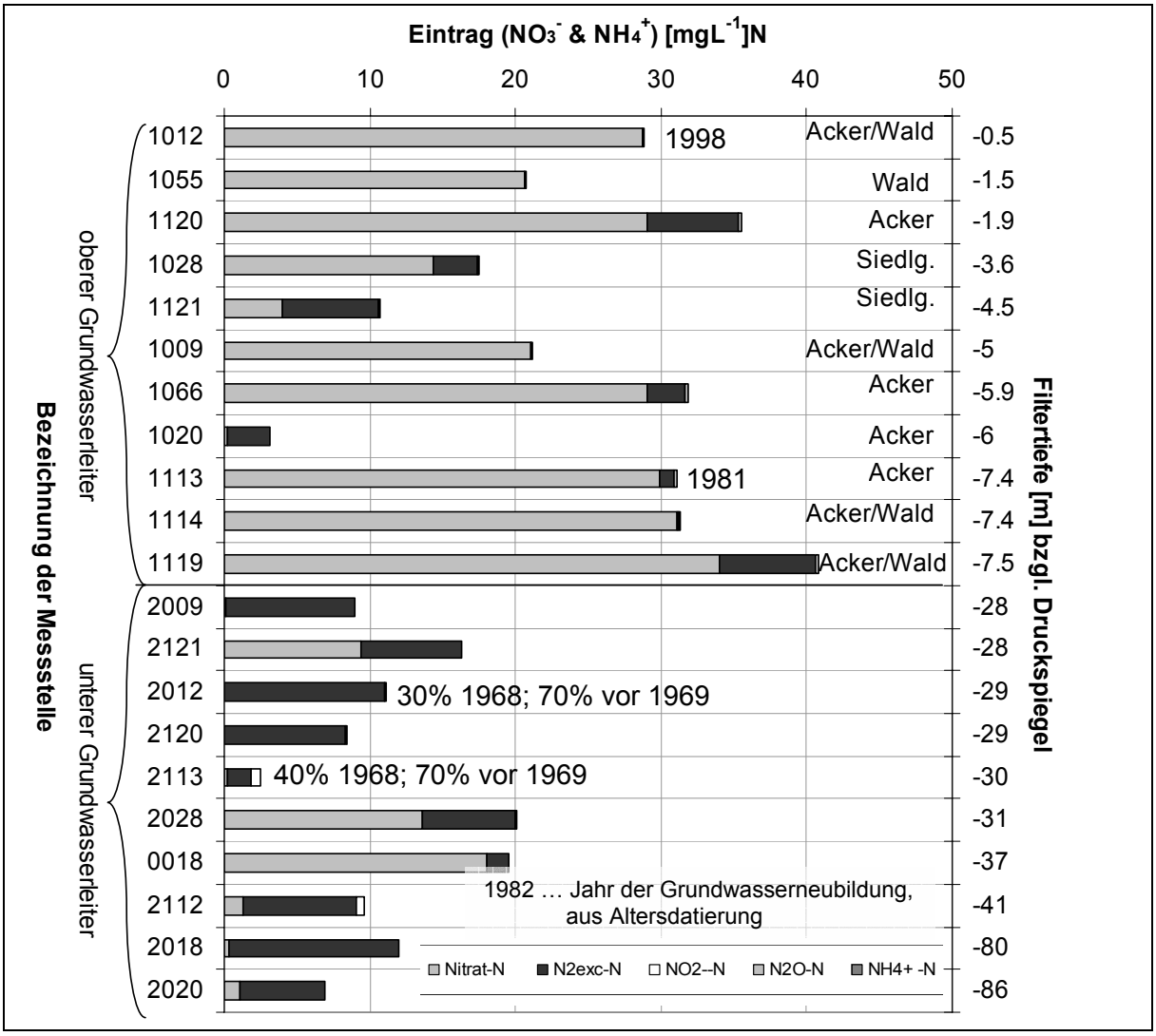


Abbildung 5-7: Schätzung von Nitrat- und Ammoniumeintrag ins Grundwasser, Wehnsen

Zeitliche Variabilität des N-Gaskonzentrationen im Grundwasser

In Tabelle 5-2 sind Differenzen und in Tabelle A3-1a, in Anlage 3, Blatt 3-3 die dazugehörigen Messwerte einzelner Parameter enthalten. Mit Ausnahme der Parameter, die an Messstelle 2113 gemessen worden sind, liegen die Werte vom Oktober 2005 in einer vergleichbaren Größenordnung wie im Juni 2004.

Tabelle 5-2: Differenzen (Juni 2004 und Oktober 2005) ausgewählter Messwerte, Wehnsen

Parameter \ Messstelle	1119	2009	2121	2012	2120	2113	2112	2018	
Diff(NO_3^--N)[1)]	-1,45	1,63	0,07	0,13	0	-0,12	5,32	0,02	[mg·l^{-1}]
Diff(N_{2_exc}-N)[1)]	-2,79	-5,82	-0,78	-1,03	1,83	16,54	-2,85	-0,39	[mg·l^{-1}]
Diff(N_2O-N)[1)]	-0,7	31,7	5,0	10,9	-0,8	-5,1	-15,9	-0,6	[µg·l^{-1}]
Diff(D)[1)]	-2,79	-5,79	-0,78	-1,02	1,83	16,54	-2,87	-0,39	[mg·l^{-1}]

[1)]Differenz aus den gemessenen Parametern 2005 und 2004

5.1.4 Diskussion und Bewertung

Ausweisung von Bereichen reduzierenden Milieus im Aquifer

Mit Hilfe von Sauerstoff- und Nitratkonzentrationen kann für das Einzugsgebiet einer Messstelle die Aussage getroffen werden, ob Denitrifikation, bei vorhandenen Reaktionspartnern, potentiell möglich ist oder nicht. Die Lage des Übergangs vom oxidierenden zum reduzierenden Bereich wird auf die Lage des Grundwasserspiegels bezogen. Anhand der dargestellten Konzentrationsprofile liegt dieser Übergang im Aquifer Sulingen, siehe Abbildung A3-6, Anlage 3, Blatt 3-11, bei etwa 15 m unter Grundwasserspiegel. Für Thülsfelde, siehe Abbildung A3-4, Anlage 3, Blatt 3-6, liegt der Übergang vom oxidierenden zum reduzierenden Milieu zwischen 5 und 10 m unter Grundwasserspiegel. Dies stimmt mit den Werten von PÄTSCH (2006) für Fassung A überein.

Diese Ausdehnung der oxidierenden Zone liegt im Bereich von Literaturangaben, beispielsweise APELLO & POSTMA (1996). Im Gebiet Wehnsen, siehe Abbildung A3-3, Anlage 3, Blatt 3-6 ist im oberen Grundwasserleiter bis etwa 20 m u GOK, ein oxidierendes Milieu dominierend, während im unteren, dem Hauptgrundwasserleiter, tiefer als 20 m u GOK, ein überwiegend reduzierendes Milieu vorherrscht.

Nachweis und Quantifizierung der Denitrifikation

Die bestimmten Konzentrationen an Überschuss-N_2 liegen bei 0 bis 11,6 $mg \cdot l^{-1}N$ für Wehnsen, siehe Blatt 3-2 in Anlage 3, für Sulingen bei 0 bis 14,2 $mg \cdot l^{-1}N$, siehe Blatt 3-7 in Anlage 3 und für Thülsfelde bei 0 bis 32,1 $mg \cdot l^{-1}N$ (Blatt 3-9 in Anlage 3). Diese Werte entsprechen damit Literaturangaben, beispielsweise BÖHLKE & DENVER (1995), BLICHER-MATTHIESEN et al. (1998), PUCKETT & COWDERY (2002) oder GRIGGS et al. (2003). Somit kann auch für die drei untersuchten Grundwasserleiter Denitrifikation mit Hilfe der N_2/Ar-Methode nachgewiesen werden. Die Vertikalprofile in Anlage 3, Blatt 3-10, zeigen anhand teilweise deutlicher erhöhter N_2/Ar-Verhältnisse in Tiefen von bis zu 40 m unter Grundwasserspiegel, dass ohne stattfindende Denitrifikation Nitrat dort bereits in hohen Konzentrationen auftreten würde. Die Quantifizierung der Denitrifikation anhand der Bestimmung von Überschuss-N_2 aus N_2/Ar kann Fehler in sich bergen: Im vorliegenden Fall wurden teilweise geringere Konzentrationen von Argon gemessen, als es dem Gleichgewicht zwischen Atmosphäre und gelöstem Gas im Rahmen möglicher Temperaturen entsprechen kann, siehe Abbildung 5-3. Diese Untersättigung der Ar-Konzentration kann nicht erklärt werden, sie unterstreicht jedoch, dass nicht ausschließlich diese Methode zur Abschätzung der Denitrifikation eines Grundwasserleiters verwendet werden sollte, siehe auch BÖHLKE (2002).

Ist das Alter der Grundwasserprobe bekannt und ist Nitrat im Überschuss vorhanden, so kann mit den in Abschnitt 5.1.2.3 genannten Einschränkungen aus dem gebildeten Überschuss-N_2 eine Abbaukennwert λ_0 für die gesamte Strombahn überschlägig abgeschätzt werden. Die Werte für λ_o liegen für Wehnsen im Bereich von 0,04 bis 1,36 $mg \cdot l^{-1} a^{-1}$ NO_3^- und für Thülsfelde zwischen 0,01 und 2,79 $mg \cdot l^{-1} \cdot a^{-1}$ NO_3^-. Werte dieser Größenordnung wurden auch von PUCKETT & COWDERY (2002) für einen hydrogeologisch ähnlichen, mit 20m Mächtigkeit allerdings deutlich flacheren Aquifer bestimmt. Die hier errechneten Werte liegen weit unter den Werten, die aus den Laborversuchen (siehe Blatt 2-32 in Anlage 2) bestimmt worden sind. Ursachen dafür können sein, dass (a) entlang weiter Strecken des Antroms keine Denitrifikation stattfindet und (b) im Laborversuch hydraulisch passive Bereiche mit mögli-

cherweise hohen Reduktionsmittelgehalten durch das locker liegende Sediment erfasst werden, bei der N_2/Ar-Messung hingegen vornehmlich Prozesse in hydraulisch aktiven Bereichen. Das Phänomen der Überschätzung von Denitrifikation im Laborversuch gegenüber Feldversuchen wird häufig beobachtet, PUCKETT & COWDERY (2002) und ähnlich begründet.

Messungen an zwei, um 16 Monate versetzten Zeitpunkten ergeben für die meisten Messstellen N_2-Gehalte gleicher Größenordnung und belegen die Reproduzierbarkeit der Daten, siehe Tabelle A3-1a, Blatt 3-3 in Anlage 3. Abweichungen, speziell bei der Bestimmung von N_2O, siehe Tabelle 5-2, werden mit Messungenauigkeiten im Zuge der Analyse erklärt.

Abschätzung des N-Eintrages

Mit einer Summierung der einzelnen N-Komponenten kann unter bestimmten Voraussetzungen, dargestellt im Abschnitt 5.1.2.3, der N-Eintrages in Form von NO_3^- und NH_4^+ ins Grundwasser im Einzugsgebiet eines Messpunktes abgeschätzt werden. Die mit den vorhandenen Daten gebildeten Summen, siehe Abbildung 5-6, Abbildung 5-7 und Blatt 3-13 in Anlage 3, ergeben mit Werten zwischen 5 bis 45 $mg \cdot l^{-1}N$, verglichen mit Literaturangaben, beispielsweise in WALTHER (1999) plausible Werte für den N-Eintrag. Die große Spannweite der Werte kann mit unterschiedlichen Formen der Landnutzung im Einzugsgebiet der Filterstrecke der jeweiligen Messstelle erklärt werden. Allerdings ist auch hier die Aussagekraft einer Quantifizierung zusätzlich von der Güte der Gasprobe abhängig. Die in Abbildung 5-6 und Abbildung 5-7 und Blatt 3-13 in Anlage 3 dargestellten Einträge zeigen keine deutliche Abhängigkeit von der angegebenen Landnutzung: So sind beispielsweise im Gebiet Thülsfelde sowohl geringe, als auch hohe Einträge unter landwirtschaftlicher Nutzung (Ackerland) möglich. Das gleiche gilt für Einzugsbereiche unter forstwirtschaftlicher Nutzung. Daraus resultiert, dass anhand der hier vorliegenden Daten keine Zuordnung von Nitrateinträgen und somit auch keine Erfolgskontrolle von Änderungen der Landnutzung vollzogen werden kann. Den drei Gebieten ist ein vergleichsweise hoher Eintrag im Einzugsgebiet oberflächennaher Messstellen, verfiltert bis in eine Tiefe von etwa 10 m unter Druckspiegel, gemein. Aus tiefer verfilterten Messstellen wird offensichtlich noch Grundwasser entnommen, welches in Zeiten weniger intensiver Landbewirtschaftung gebildet worden ist.

Art der Denitrifikation

Nach der Darstellung im Dreiecksdiagramm, RÖDELSBERGER et al. (1992), siehe Anlage 3, Blatt 3-5, dominiert in Thülsfelde die chemo-lithotrophe Denitrifikation. In Sulingen und Wehnsen liegen Indizien sowohl für chemo-organotrophe, als auch für chemo-lithotrophe Denitrifikation vor. Im Gebiet Thülsfelde sind in Tiefen >20 m unter Wasserspiegel vereinzelt geringe NH_4^+ -Konzentrationen ($\beta_{NH4+} < 1$ $mg \cdot l^{-1}$) anzutreffen, siehe Anlage 3, Blatt 3-8, die auch auf dissimilatorische Nitratreduktion zu Ammonium zurückgeführt werden könnten. Eine qualitativ bedeutsame Nitrat-Elimination durch DNRA ist jedoch nicht zu vermuten.

Im Zusammenhang mit Gasmessungen, insbesondere von Überschuss-N_2, welches aus der Denitrifikation entstanden ist, können die „herkömmlichen“ Informationen zur Wasserbeschaffenheit aufgewertet werden. Für den Aquifer in Thülsfelde konnte beispielsweise ein enger Zusammenhang mit r_s = 0,72 zwischen Sulfat- und Überschuss-N_2-Gehalt festgestellt werden, der den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation ausweißt, siehe Blatt 3-12 in Anlage 3. Dies deckt sich mit zahlreichen Untersuchungen in pleistozänen Aquiferen Nordeuropas, beispielsweise KÖLLE (2001), VAN BEEK (2000), APELLO & POSTMA (1996), oder den in

KOROM (1992) zusammengestellten Versuchsergebnissen. Im Untersuchungsgebiet Wehnsen deuten Korrelationskoeffizienten auf den Ablauf beider Arten der Denitrifikation hin: r_s = 0.56 (N_2/Ar und HCO_3^-) und r_s = 0.59 (N_2/Ar und Fe_{gesamt}), siehe Blatt 3-12 in Anlage 3.

Bewertung der freigesetzten Lachgasgehalte

Die Ergebnisse der Lachgasmessung sind in Tabelle 5-3 einigen Literaturwerten gegenübergestellt. Eine Übersicht über gemessene N_2O-Konzentrationen an unterschiedlichen Standorten, vornehmlich im Bodenwasser, geben HEINCKE & KAUPENJOHANN (1999) an. Die Spannweite der darin angegebenen Werte umfasst 0,5 bis 9984 $\mu g \cdot l^{-1}$ N_2O-N. Die hier ermittelten Ergebnisse liegen im Bereich von Literaturwerten für Grundwasserleiter.

Tabelle 5-3: Vergleich von Ergebnissen von N_2O-Messungen im Grundwasser

Gebiet	Spannweite [$\mu g \cdot l^{-1}$] N_2O	Quelle
Wehnsen_oGWL	12,5 bis 386 (79,6)[1)]	
Wehnsen_uGWL	3,6 bis 997 (217,1)[1)]	
Thülsfelde	1,0 bis 840 (120,2)[1)]	
Kalkaquifer/Ost-England	26,5[2)]	HISCOCK et al. (2003)
Nordwestdeutschland (Grundwasser, oberflächennah[3)])	31,4 bis 4.700	WELL et al. (2005)

[1)]Mittelwert, [2)]Median, [3)]bis maximal 0,50 m unter Grundwasserspiegel, bzw. 2.20 m u GOK

Zur Quantifizierung der Nitratelimination im Einzugsgebiet von Vorfeldmessstellen im tieferen Grundwasser spielen die Gehalte an Nitrit und Lachgas gegenüber N_2 eine unbedeutende Rolle. Dennoch kann die Denitrifikation im tieferen Grundwasser durch N_2O-Produktion potentiell zur Lachgas-Emission beitragen, wenn eine Ausgasung beispielsweise in Druck-Entlastungsbereichen, beispielsweise im Anstrom von Oberflächengewässern, erfolgt.

5.2 Weiterentwicklung und Anwendung einer in situ - Methode zur Bestimmung der Denitrifikation im tieferen Grundwasserleiter

5.2.1 Ziele

Unter in situ – Versuchen ist im vorliegende Fall die Injektion von gelöstem Nitrat über eine Grundwassermessstelle in den Aquifer mit anschließender Probenahme zu verstehen. Synonym werden die Bezeichnungen Einbohrloch-Tracerversuch oder auch "Push&Pull Test" verwendet. Die in diesem Abschnitt vorgestellten Tracerversuche haben die folgenden Ziele:

(a) Die von WELL et al. (2003) im oberflächennahen Grundwasser eingesetzte Methode der Injektion von $^{15}NO_3^-$ mit anschließender N-Gasmessung soll an neu errichteten und bestehenden Grundwassermessstellen mit einem Durchmesser von 2" bis 4" eingesetzt werden. Es ist zu testen, ob der Einsatz der dafür vorgesehenen Doppel-Packer-Technik, beispielsweise LUCKNER & SCHESTAKOW (1986) erfolgreich ist. Erfolgreich bedeutet, dass ein sauerstoffarmes Milieu im Bereich der Messstelle nach der Injektion erhalten bleibt.

(b) Es wird getestet, ob in den Nahbereich einer Messstelle injiziertes $^{15}NO_3^-$ durch Denitrifikation umgesetzt wird und durch ^{15}N-Gasmessungen nachgewiesen werden kann.

(c) Für einige neu errichtete Messstellen im Gebiet Wehnsen und Sulingen liegen Bohrkerne aus der Teufe des jeweiligen Filterbereiches vor. Am Sediment dieser Bohrkerne wurden Laborversuche, siehe Kapitel 4, durchgeführt. Es wird geprüft, inwieweit die Ergebnisse von Batch- und in situ -Versuchen übereinstimmen. Weiterhin werden Aussagen getroffen, ob eine Quantifizierung des Gehaltes an Reduktionsmitteln im Grundwasserleiter über Regressionsbeziehungen aus den Feldversuchen möglich ist.

(d) Es soll die Größenordnung der Denitrifikation (D(t), λ-Werte) im Nahbereich der Filterstrecke einer Messstelle für die drei Untersuchungsgebiete[2] bestimmt werden. Anhand diese Werte und den Ergebnissen der Gasmessungen und Laborversuche, wird geprüft, ob mit der in situ – Methode eine Charakterisierung des Grundwasserleiters hinsichtlich Denitrifikation möglich ist, siehe auch Kapitel 6.

5.2.2 Methoden und Vorgehensweise

5.2.2.1 Hintergrund

In situ Versuche werden seit den den 1980er Jahren angewendet, wie Abschnitt 5.2.2.2 näher beschreibt. Das Prinzip der in situ -Versuche besteht darin, dass durch die Injektion von Nitrat Umsatzprozesse wie die Denitrifikation hervorgerufen werden. Die Konzentrationen von Nitrat und möglicher Reaktionsprodukte des N-Umsatzes werden gemessen. Neben Nitrat wird auch ein konservativer Tracer, wie beispielsweise Bromid, in den Grundwasserleiter injiziert. Der zeitliche Konzentrationsverlauf des konservativen Tracers ermöglicht eine Quantifizierung des advektiven und hydrodynamisch-dispersiven Transports und der damit ver-

[2] Wassereinzugsgebiete: Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde (Fassung A)

bunden „Verdünnung“ der Injektionslösung im Bereich der Injektionsstelle. Der Konzentrationsverlauf des Nitrates oder der möglicher Reaktionsprodukte eines Nitratabbaus: N_2, N_2O, NO_2^- oder NH_4^+ wird um den Einfluss der „Verdünnung“ korrigiert und ermöglicht so die Quantifizierung des N-Umsatzes innerhalb der Versuchsdauer.

Die in situ – Bestimmung des N-Umsatzes bietet gegenüber dem Laborversuch zahlreiche Vorteile: Eine Gesteinsentnahme mit der dadurch bedingten Veränderung der Probe entfällt. Der Arbeitsaufwand ist wesentlich geringer als bei der Durchführung einer Bohrung mit Gesteinsentnahme und anschließenden Laboruntersuchungen. Die Rahmenbedingungen (Temperatur, Fließgeschwindigkeit, vorhandene Bioszönose) bleiben beim in situ -Versuch im Gegensatz zu Laborversuchen erhalten. Einen Eingriff in das System Aquifer stellen lediglich die Infiltration und die Entnahme von Grundwasser dar.

5.2.2.2 Bisher angewendete Versuchsanordnungen

Neben der Einbohrlochmethode, bei der die Proben an der Injektionsstelle selbst entnommen werden, so zum Beispiel bei TRUDELL et al. (1986), WELL et al. (2003), ADDY et al. (2002), SANCHEZ-PEREZ et al. (2003), ist auch eine Entnahme aus dem Abstrombereich, Mehrbohrlochmethode, siehe PAUWELS et al. (1998), SMITH et al. (2004), möglich. Denitrifikation wird in den drei, hier untersuchten Gebieten als Hauptumsatzprozess vermutet. Deshalb wird auf in situ Versuche, mit denen andere Eliminationsprozesse, wie beispielsweise Sorption identifiziert werden soll, siehe WALTHER et al. (2002), an dieser Stelle nicht weiter eingegangen.

Hinsichtlich der Art der Injektion des Tracers und der Analyse wurden bisher 3 Methoden angewendet:

(1) Die Arbeit mit nicht-markiertem Nitrat, beispielsweise von TRUDELL et al. (1986). Bei diesem Verfahren wird der N-Umsatz aus dem Verlauf der um den Einfluss der Transportprozesse im Grundwasser korrigierten Nitratkonzentration abgeleitet. Die Nachteile dabei sind, dass einerseits sämtliche nitratmindernde Prozesse als Summe erfasst werden und keine eindeutige Abgrenzung der Denitrifikation von anderen Prozessen wie zum Beispiel der DNRA oder Nitratsorption möglich ist. Zum anderen kann ein quantitativ geringfügiger Umsatz vom Fehlerbereich der Analytik überlagert werden. In den meisten fällen wird darum eine große Injektionsmenge und eine entsprechend lange Versuchsdauer, beispielsweise 2 Wochen siehe TRUDELL et al. (1986) notwendig sein, um verwertbare Aussagen zu erhalten.

(2) Mit der Acetylen-Inhibitionsmethode wird die Denitrifikation beim Lachgas gestoppt und dieses analysiert. Der Nachteil dieser Methode, die u.a. SÁNCHEZ-PÉREZ et al. (2003), WELL et al. (2003), SMITH et al. (1996) angewendet wurde, ist eine mögliche Unterschätzung der Denitrifikation, wenn keine vollständige Inhibition des Umsatzes vom N_2O zum N_2 erfolgt.

(3) Wird mit markiertem Nitrat ($^{15}NO_3^-$) gearbeitet, ist eine Bestimmung der durch Denitrifikation entstehenden N-Gase möglich, WELL et al. (2003), ADDY et al. (2002), KELLOG et al. (2005). Diese Methode wurde bisher nur im oberflächennahen Grundwasser an eigens dafür errichteten Messstellen durchgeführt. Unter oberflächennahem Grundwasser wird hier eine Tiefe bis maximal 5 m unter Grundwasserspiegel definiert. Der Nachteil für die großflächige praktische Anwendung sind die derzeit hohen Kosten für ^{15}N-angereichertes Nitrat und die entsprechend notwendige Isotopenanalyse.

Die Versuchsdauer für die Einbohrlochmethode reicht von 4 Stunden, SÁNCHEZ-PÉREZ et al. (2003) bis hin zu etwa 18 Tagen, TRUDELL et al. (1986). Einige Autoren, beispielsweise ADDY et al. (2002) verwendeten eigens dafür entwickelte Messstellen (Mini-Piezometer). Als konservativer Tracer wird meist Bromid eingesetzt. ADDY et al. (2002) verwenden auch Sulfur-Hexafluorid. Von den genannten Autoren wurden mit Ausnahme von PAUWELS et al. (1998) die Versuche im Lockersediment durchgeführt. Ein großflächiger Einsatz der Einbohrloch-Tracermethode im tieferen Grundwasser, das heißt tiefer als 5 m unter Grundwasserspiegel, erfolgte bislang nicht.

5.2.2.3 Versuchsaufbau und -durchführung

Versuchsaufbau

Die maximal 2 m lange Filterstrecke der jeweiligen Messstelle wurde nach oben und - sofern sich unterhalb keine Abschlusskappe befindet - auch nach unten hin mit aufblasbaren Gummi-Packern abgedichtet, siehe Abbildung 5-8.

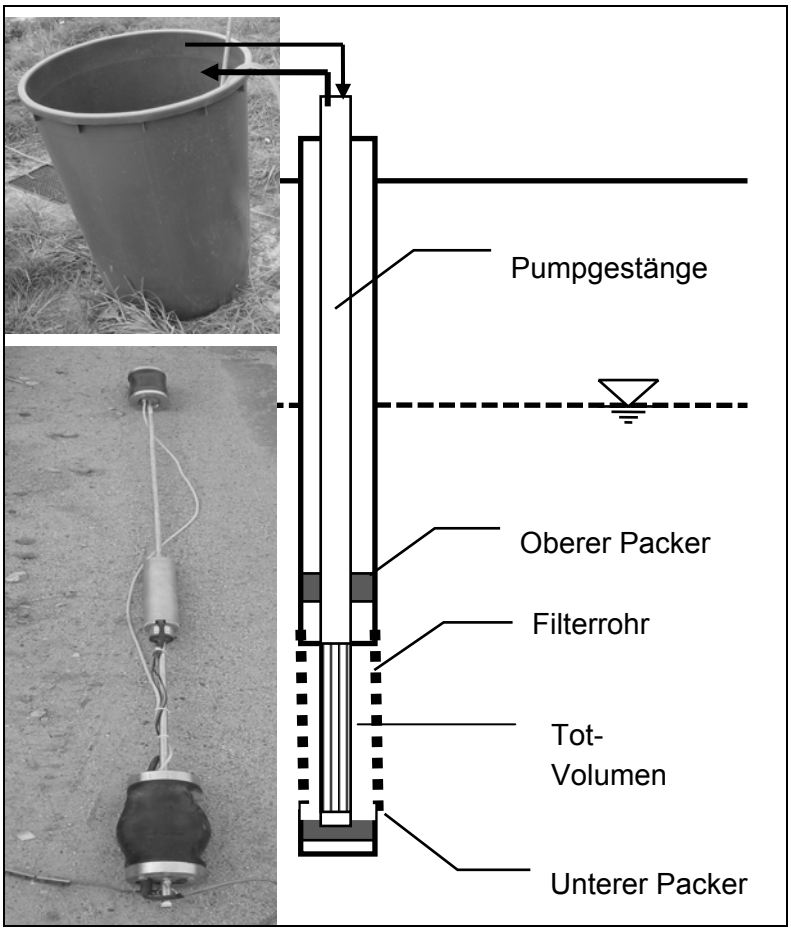


Abbildung 5-8: Anordnung des in situ - Versuches

Zwischen den beiden Packern ist die Entnahmepumpe (MP1) installiert worden. Während der Grundwasserentnahme wurden die Parameter elektrische Leitfähigkeit, Redoxpotential sowie Sauerstoffgehalt aufgezeichnet. Nach Erreichen des hydraulischen und des Beschaffenheitskriteriums, siehe DVWK (1997), wurden pro 2“-Messstelle 100 l und pro 4“-Messstelle 200 l Grundwasser in ein Behältnis (Fass) gefüllt und die Grundwasserentnahme gestoppt. In das abgepumpte Grundwasser, welches sich in einem Fass befindet, wurde eine

Lösung gegeben, die mit ^{15}N-Nitrat (60 atom% oder 75 atom%) sowie Bromid versetzt worden ist. Die Prozentzahl, 60 atom% oder 75 atom%, gibt an, wie groß der Anteil des markierten ^{15}N im Nitrat ist. Für die hier beschriebenen Versuche wurde jeweils 1 g ^{15}N als KNO_3 und 1g Br^- auf 100 l Grundwasser gegeben bzw. jeweils 2 g auf 200 l. Eine Ausnahme bildete lediglich der Versuch W2113W mit 4 g Br^- auf 200 l. Das Wasser hatte damit eine Konzentration von 44 $mg \cdot l^{-1}$ $^{15}NO_3^-$ und 10 $mg \cdot l^{-1}$ Br^- und wurde über die Wirkung der Schwerkraft in den abgepackerten Bereich der Grundwassermessstelle re-infiltriert. Es wurde darauf geachtet, einen Sauerstoffeintrag in die Tracerlösung zu vermeiden. Über die gesamte Versuchsdauer verblieben Pumpe, Packer und Gestänge in der Messstelle.

Das Wasser, welches sich in den Steigleitungen, im abgepackerten Bereich der Filterstrecke und im Ringraum der Messstelle befand, hatte keinen direkten Kontakt zum Aquifer. Dieses Wasservolumen wird als Totvolumen bezeichnet und musste vor jeder Probenahme abgepumpt und verworfen werden, da es seit der vorangegangenen Probenahme keinen direkten Kontakt mit dem Aquifer hatte und somit kein Nitrat umgesetzt werden konnte.

Bromid fungierte als konservativer Tracer. Aus dem Verlauf der Bromidkonzentration wurde die Wirkung von Advektion und hydrodynamischer Dispersion auf der Verringerung der Konzentration des Nitrates und der gebildeten ^{15}N-Gase bzw. des Nitrits ermittelt.

Die in Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde durchgeführten Einbohrloch-Tracerversuche sollen der Entwicklung einer praktikablen Methode für Ingenieurbüros und Wasserwerksbetreiber dienen. Aus diesem Grunde wurde:

- die Versuchsdauer auf 2 bis 3 Tage beschränkt,
- keine Spezialanfertigungen, sondern Messstellen mit 2“ und 4“ Durchmesser errichtet und
- neben den neu errichteten auch vorhandene Vorfeldmessstellen genutzt.

Probenahme

Die Probennahme wurde in festen Zeitabständen über eine Zeitdauer von 2 bis 3 Tagen durchgeführt. Die erste Probe wurde 24 Stunden nach Versuchsbeginn entnommen, weitere Proben im regelmäßigen Abstand von 12 Stunden. Das Grundwasser wurde mit einer Entnahmerate von Q = 0,5 bis 2 $l \cdot min^{-1}$ entnommen.

Für die Gasanalyse wurden je Probenahme 3 Wasserproben entnommen. Jeweils etwa 80 ml Wasser wurden in eine 115 ml teilevakuierte Glasflasche (Vial) eingefüllt. Vor Ort wurden durch Schütteln (1min per Hand) die gelösten Gase in die Gasphase überführt. Aus dem Gasraum der 115 ml – Flasche wurde mit gasdichten Spritzen 30 ml Gas in vor Ort evakuierte und mit einem Gummi-Septum verschlossene Glasröhrchen (Labco®) gefüllt. Die Gasanalyse erfolgte am Kompetenzzentrum Stabile Isotope, Forschungszentrum Waldökosysteme der Universität Göttingen. Dabei wurde aus dem $^{15}(N_2+N_2O)$-Gehalt entsprechend des injizierten 60 oder 75 atom% ^{15}N-Nitrates, das durch Denitrifikation umgesetzte Nitrat bestimmt, siehe auch WELL & MYROLD (2002). Aus diesem Grunde wird im Folgenden nicht von $^{15}N_2$ sonder von N_{2_Deni}, das heißt infolge von Denitrifikation entstandenes N_2, gesprochen.

Bei jeder Probenahme wurden die Sofortparameter Sauerstoffgehalt, Redoxpotential, pH-Wert, elektrische Leitfähigkeit, Temperatur und m-Wert (Titration mit 0,01 HCl bis pH 4,3) Vorort bestimmt.

Einzelne Proben wurden im Labor auf die Konzentration der Kationen Mn_{gesamt}, $Fe_{gesamt,}$ und NH_4^+ analysiert, Anlage 3, Tabelle A3-9. Dazu wurden im Feld jeweils 100 ml Wasserprobe filtriert (Zelluloseacetatfilter 0,45µm) und mit 1 ml 0,1 molarer Salpetersäure versetzt. Für die Bestimmung der Anionen NO_3^-, SO_4^{2-}, Cl^-, Br und NO_2^- wurden 100 ml Wasserprobe filtriert (Zelluloseacetatfilter 0,45 µm).

Numerische Berechnung des Verhaltens der Injektionslösung

Zur Visualisierung der Injektion und Bewegung der Tracerwolke im Grundwasser, sowie zur Abschätzung der Eindringtiefe und der maximalen horizontalen Bewegung der Tracerwolke in Abhängigkeit der Aquiferparameter, wurde ein exemplarisches numerisches Modell aufgebaut. Die Variation der Modellparameter soll für das Spektrum der betrachteten Grundwasserleiter Auskunft über das Verhalten einer inerten Tracerwolke liefern. Kenngrößen des Modells sind in Tabelle A3-6 in Anlage 3, Blatt 3-14 beschrieben.

In Abbildung 5-9 ist die Konzentration des Tracers unmittelbar nach der Injektion dargestellt. Die Form der injizierten Tracerwolke erscheint plausibel: Die Injektion erfolgt über die Pumpe in der Mitte der Filterstrecke. An dieser Stelle dringt ein Teil des Wassers sofort in den Aquifer ein. Der weitaus größere Teil jedoch verteilt sich aufgrund des fehlenden hydraulischen Widerstandes im Messstellenrohr zwischen den beiden Packern und dringt dann etwa gleichmäßig in den Aquifer ein. Die Berechnung beruht auf der Annahme eines vollkommen homogenen Untergrundes und ist somit schematisiert. Unter natürlichen Gegebenheiten ist von einer Fingerbildung entlang hydraulisch begünstigter Bereiche auszugehen.

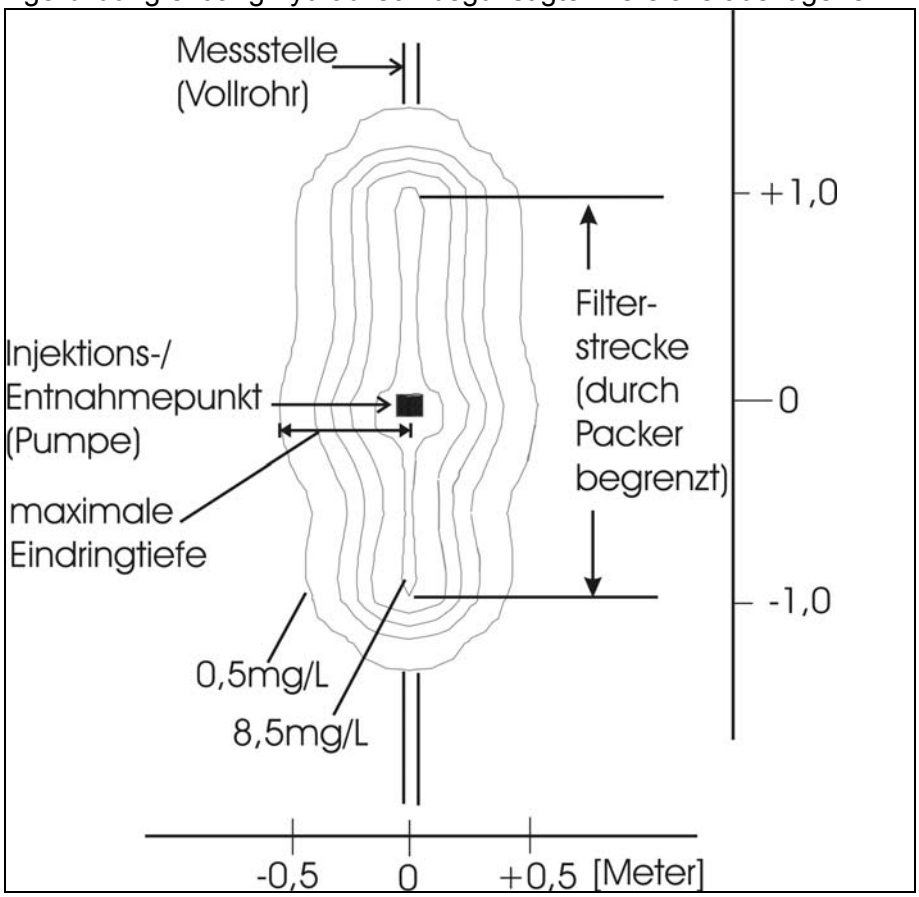


Abbildung 5-9: Numerische Berechnung der Ausbreitung der Injektionslösung

Als Ergebnis-Kenngrößen der Modellierung werden dabei die maximale Eindringtiefe in den Aquifer, bezogen auf die Achse des Filterrohres und den Zeitpunkt t_o (abgeschlossene Injektion) und die maximale Verschiebung des Konzentrationsmaximums von der Achse der Filterstrecke nach einer Versuchsdauer von t = 72 h betrachtet. Die berechneten Ergebnisse sind in Anlage 3 graphisch in Abbildung A3-8 (Blatt 3-14) und A3-9 (Blatt 3-15) dargestellt. Erwartungsgemäß hat eine Veränderung der nutzbaren Porosität der stärksten Auswirkungen auf die maximale Eindringtiefe des Tracers in den Aquifer. Diese beträgt demnach für eine effektive Porosität von n_e = 0,1 etwa 70 cm ab der Mitte des Filterrohres. Die maximale Verschiebung des Konzentrationsmaximums nach einer Versuchsdauer von 72 h ist erwartungsgemäß maßgeblich vom hydraulischen Gefälle und der hydraulischen Leitfähigkeit K abhängig. Beträgt das hydraulische Gefälle i ≥ 0,01 (bei $K \geq 10^{-4}$ $m \cdot s^{-1}$) oder die hydraulische Leitfähigkeit von $K \geq 10^{-3}$ $m \cdot s^{-1}$ (bei i ≥ 0,001), so ist eine vollständige Abwanderung der injizierten 200 l des Tracers innerhalb der Versuchsdauer von 72 h zu befürchten. Für die hier vorgestellten Untersuchungsgebiete ist die hydraulische Leitfähigkeit, bzw. das hydraulische Gefälle (siehe Kapitel 3) geringer als diese Werte, so dass eine solche vollständige Abwanderung vermutlich nicht stattfindet.

5.2.2.4 Vorgehensweise bei der Versuchsauswertung

Korrektur der gemessenen Konzentrationen um den Einfluss von Advektion und hydrodynamischer Dispersion

Die Konzentration der durch Denitrifikation entstandenen Gase (N_2O+N_2)-N und Nitrit werden durch die natürliche Grundwasserströmung (Advektion) und die damit verbundenen hydrodynamische Dispersion aus dem Nahbereich der Messstelle - wie erwähnt - verringert. Der Konzentrationsverlauf des als idealen Tracer angenommenen Bromids dient zur Quantifizierung dieser Minderung, siehe auch SÁNCHEZ-PÉREZ et al. (2003):

$$\beta_{N\_Korr}(t_i) = \beta_{N\_gem}(t_i) \cdot f_{Br-relativ}(t_i) \qquad (5-6)$$

$$mit: \quad f_{Br-relativ}(t_i) = \frac{\beta_{Br}(t_o)}{\beta_{Br}(t_i)}$$

$\beta_{N\_Korr}(t_i)$	…	um den Einfluss von Advektion und hydrodynamischer Dispersion korrigierte Konzentration des N-Gehaltes für t_i
$\beta_{N\_gem}(t_i)$	…	gemessene N-Konzentration zum Zeitpunkt t_i
$f_{Br\text{-}relativ}(t_i)$	…	Korrekturfaktur
$\beta_{Br}(t_o)$	…	Konzentration des Bromids zu Versuchsbeginn
$\beta_{Br}(t_i)$	…	gemessene Konzentration des Bromids zum Zeitpunkt (t_i)

Quantifizierung der Denitrifikation an den in situ Versuchen

Die Größenordnung der Denitrifikation wird für die Feldversuche mit Umsatzkennwerten 0. und 1. Ordnung dargestellt. Dafür ist die Denitrifikation als Rückgang der Nitratkonzentration auszudrücken, das heißt:

$$\Delta\beta\{NO_3^- - N_{Deni}\}(t_i) = \beta\{NO_3^- - N\}t_o - D(t_i) \qquad (5-7)$$

$$= \beta\{NO_3^- - N\}t_o - \beta\{(N_2 + N_2O + NO_2^-) - N_{Deni}\}(t_i) \qquad (5-7a)$$

mit:

$\Delta\beta\{NO_3^-\text{-}N_{Deni}\}$ ... Änderung der Nitratkonzentration infolge Denitrifikation

$\beta\{NO_3^-\text{-}N\}t_o$ ... Nitratkonzentration unmittelbar nach der Injektion

D ... Denitrifikation, bestimmt aus denitrifikationsbürtigen Konzentrationen von N_2-N, N_2O-N und NO_2^--N

$$D(t) = \beta\{N_2\text{-}N\}(t) + \beta\{N_2O\text{-}N\}(t) + \beta\{NO_2^-\text{-}N)\}(t) \quad (5 – 7b)$$

t_i ... Versuchsdauer

Die Umsatzkennwerte (λ) werden mit Gleichung (4-11) und (4-12), auf Basis der Werte $\Delta\beta\{NO_3^-\text{-}N_{Deni}\}(t_i)$ mit t = 24 h, 36 h und 48 h durch Anpassung von Regressionsfunktionen nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt. Diese drei Zeitpunkte wurden gewählt, da nur dafür von allen Versuchen Messergebnisse vorliegen. Die λ-Werte müssen für die jeweils gleiche Versuchsdauer bestimmt werden, um vergleichbar zu sein. Die Ergebnisse werden unter Abschnitt 5.2.3. vorgestellt.

Art der Umsatzprozesse

Entsprechend der Arbeitshypothese, dass die Denitrifikation der dominierende Eliminationsprozess des Nitrates im Grundwasserleiter der drei betrachteten Gebiete ist, wurden die N-Reaktionsprodukte N_2, N_2O und NO_2^- gemessen. Diese können der zeitlichen Entwicklung der NO_3^- -Konzentration gegenübergestellt werden. Da Ammonium nach Gleichung (2-2) ebenfalls ein mögliches Produkt des Nitratumsatzes ist (DNRA), wurde dessen Konzentration an einigen Zeitpunkten bestimmt. Um zu beweisen, dass gegebenenfalls auftretendes Ammonium aus dem injizierten Nitrat gebildet worden ist, müsste der ^{15}N-Gehalt des NH_4^+ bestimmt werden. Dies erfolgte im Rahmen dieser Untersuchungen nicht. Zur Identifizierung der Art der Denitrifikation werden die folgenden Konzentrationen in Anlage 3 graphisch dargestellt: SO_4^{2-}, Abbildung A3-11, HCO_3^-, Abbildung A3-15 und der pH-Wert, Abbildung A3-14, sowie für einen Versuch auch der DOC, Abbildung 5-14. Veränderungen des zeitlichen Verlaufs dieser Parameter können die Art der Denitrifikation signalisieren, siehe Kapitel 2.

Reproduzierbarkeit der Ergebnisse

Je zwei Versuche in Wehnsen und Thülsfelde wurden jeweils an der selben Messstelle im Abstand von jeweils etwa einem Jahr durchgeführt. Es handelt sich dabei um Messstellen, an denen normalerweise, das heißt wenn kein Nitrat injiziert wurde, kein Nitrat gemessen wird. Somit unterliegt der Reduktionsmittelvorrat im Nahbereich der Filterstrecke üblicherweise keinem Aufbrauch durch Denitrifikation. Die Ergebnisse wurden einander gegenübergestellt und verglichen, Abschnitt 5.2.3.2., Abbildung 5-15. Anhand des Vergleichs können Aussagen über die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse derartiger Tracerversuche getroffen werden.

Vergleich von Labor- und in situ Versuchen

Verglichen wird jeweils die Größe der Denitrifikation von Labor- und Feldversuchen an ausgewählten Zeitpunkten, für die Messergebnisse vorliegen. Weiterhin wird der Korrelationskoeffizient nach Spearman für $D_{Labor}(t)$ und $D_{Feld}(t)$ für (a) ausgewählte Zeitpunkte sämtlicher Versuche und (b) für die jeweilige Versuchsdauer von jeweils einem Versuchs-Paar (Feld-Labor) berechnet. Die Art der ablaufenden N-Umsatzprozesse, soweit diese identifizierbar sind, sollen ebenfalls verglichen werden.

Aus dem Teufenbereich der Filterstrecken der Tracerversuche W2123, W2122, W2113, S123 und S128 lagen Bohrkerne vor, die im Labor untersucht worden sind. Zusätzlich zu den im Kapitel 4 dargestellten Batchversuchen wurden an Mischproben aus je zwei 1-Meter-Bohrkernen der 3 Bohrungen in Wehnsen weitere Batchversuche mit Beprobungen nach 24 h, 36 h, 48 h, 60h und 72 h durchgeführt. Die Versuchsbezeichnungen lauten W120 für Bohrung W2122, W340 für Bohrung W2123 und W780 für Bohrung W2113. Die Daten sind in Anlage 3, Tabelle A3-11, die Teufen in Anlage 6, Tabellen A6-1 bis A6-3, zu finden. Somit liegen jeweils 5 korrespondierende Beprobungszeitpunkte für Feld- und Laborversuch vor.

Für einen Vergleich werden die Konzentrationen der in situ -Versuche mit [$mg \cdot kg^{-1}$] auf die Masse trockenen Sedimentes bezogen. Somit liegen die Daten aus Feld- und Laborversuch in der gleichen Dimension vor. Für die Umrechnung der beim in situ -Versuch gemessenen Konzentrationen von [$mg \cdot l^{-1}$] in [$mg \cdot kg^{-1}$] ist folgendes anzumerken: Wird in den Grundwasserleiter Nitrat injiziert, so finden mögliche Umsatzprozesse von Nitrat und Reduktionsmitteln des Korngerüstes an der Sedimentoberfläche statt. Bei einer räumlichen Gleichverteilung von Reduktionsmitteln innerhalb des durch das injizierte Nitrat ausgewiesenen potentiellen Reaktionsraumes, wäre die Denitrifikation in Zonen verhältnismäßig hoher innerer Oberfläche des Korngerüstes wegen der größeren Kontaktfläche stärker. Der Bezug von umgesetzter Nitratmenge müsste demnach streng genommen auf die hydraulisch verfügbare Oberfläche des Sedimentes, sprich der Kontaktfläche, bezogen werden. Beim Batchversuch ist ein intensiverer Kontakt zwischen Sediment und nitrathaltigem Grundwasser möglich, da das Sediment locker gelagert ist und durch die Probenahme wegen der Kopfüber-Lagerung der Versuchsflasche eine Durchmischung beider Komponenten zustande kommt. Die innere Oberfläche der Sedimentproben wurde nicht bestimmt. Für kugelförmige Körner ist ein Zusammenhang zwischen innerer Oberfläche und Sedimenttrockenmasse, respektive Gesamtporenraum der Probe anzunehmen, siehe MATTHEß & UBELL (1983). Die Umrechnung der Konzentration von [$mg \cdot l^{-1}$] in [$mg \cdot kg^{-1}$] erfolgt nach:

$$\beta[mg \cdot kg^{-1}] = \beta[mg \cdot l^{-1}] \cdot \frac{n}{(1-n)\rho[kg \cdot l^{-1}]} \qquad (5-8)$$

Dabei ist n der Gesamtporenraum und ρ die Dichte des trockenen Sedimentes, die mit ρ = 2.66 $kg \cdot l^{-1}$ angesetzt wird. Bei Injektion des Tracers wird nur das nutzbare Porenraumvolumen n_e ausgetauscht. Durch Diffusion findet jedoch innerhalb des Versuchszeitraumes von mehreren Stunden ein Konzentrationsausgleich zwischen Haft- und mobilem Wasser statt, so dass der Gesamtporenraum berücksichtigt werden muss. Der Gesamtporenraum ist für das jeweilige Sediment an den Säulenversuchen bestimmt worden, siehe Anlage 2, Blatt 2-41. Da die Lagerungsdichte im Untergrund möglicherweise von diesen Werten abweicht, ist eine Variation der Größe des angesetzten Gesamtporenraumes notwendig.

Besteht ein Zusammenhang zwischen Labor- und Feldversuch, so werden Regressionsbeziehungen abgeleitet. Dies erfolgt zum einen durch die Berechnung von D_{insitu} aus D_{Labor} und zum anderen für die gesamte, potentiell mögliche Denitrifikation aus D_{insitu}. Im Kapitel 4 wurde geschildert, dass die potentielle Denitrifikation anhand von Batchversuchen abgeleitet wird, bei denen Umsatz stattgefunden hat, dieser aber bereits abgeschlossen ist. Nur an wenigen Batchversuchen ist die Denitrifikation innerhalb einer Versuchsdauer von 19 Monaten zum Abschluss gekommen. Als Ersatzgröße der potentiellen Denitrifikation wird die Denitrifikation $D_{(365d)}$ innerhalb eines Jahres Versuchsdauer verwendet, da für diesen Parameter für Batchversuche der Gebiete Wehnsen und Sulingen Daten vorliegen.

Abschätzung des Gehaltes an Reduktionsmitteln

Aus der Denitrifikation am Tracerversuch soll über Regressionsbeziehungen auf den Gehalt an Reduktionsmitteln geschlossen werden. Die Güte des Zusammenhangs zwischen Reduktionsmittelgehalt und D_{insitu} wird mit dem Korrelationskoeffizienten (r_s) quantifiziert.

5.2.3 Ergebnisse

5.2.3.1 Messwerte

Die gemessenen Werte für die in Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde durchgeführten Tracerversuche sind in Anlage 3, Blatt 3-15 bis Blatt 3-18 angegeben. Darin enthalten sind ebenfalls die jeweiligen Zeitpunkte der Versuchsdurchführung in den Jahren 2003 bis 2005.

Die Abbildung 5-10 zeigt den zeitlichen Verlauf der Sauerstoffkonzentrationen. Die angegebenen Werte für den Zeitpunkt „0“ stellen die O_2-Hintergrundkonzentration im Aquifer im Bereich der Messstelle dar. Wie hoch die Sauerstoffkonzentration im Grundwasser unmittelbar nach der Injektion war, ist unbekannt. Aus diesem Grund ist der Zeitabschnitt zwischen „0“ und erster Probenahme durch eine gestrichelte Linie angegeben.

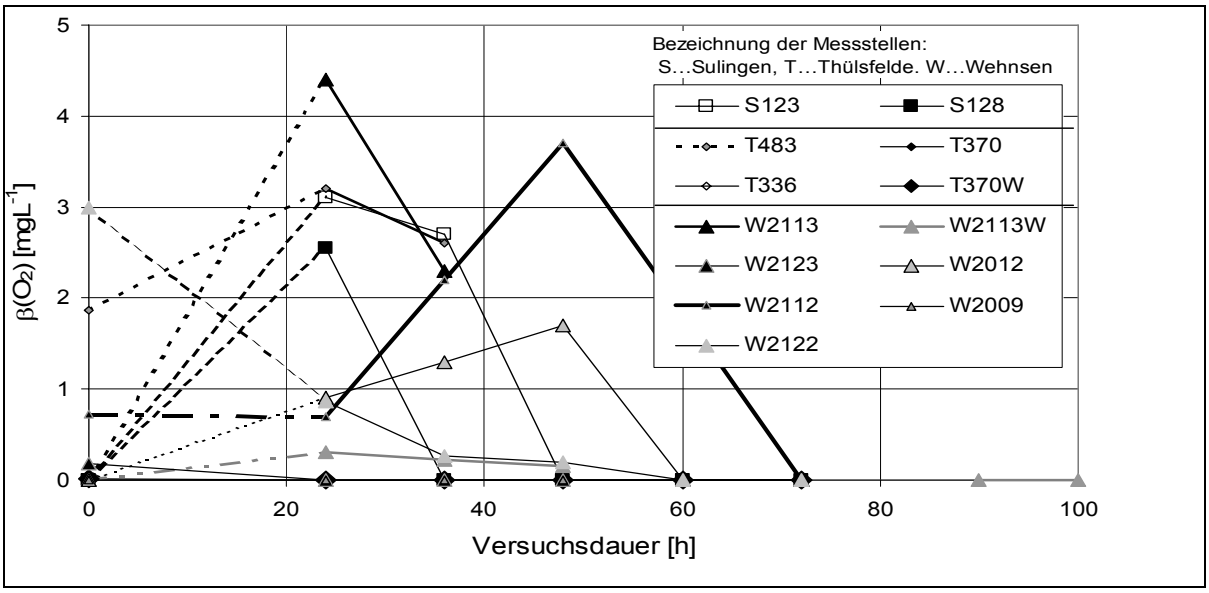


Abbildung 5-10: Gemessene Sauerstoffkonzentrationen bei den in situ – Versuchen

Bei den Versuchen wird durch die Injektion des mit dem Tracer versetzten Grundwassers die Konzentration des gelösten Sauerstoffs um maximal 4,5 $mg \cdot l^{-1}$ erhöht. Die O_2-Konzentration nimmt nach einigen Stunden jedoch wieder ab.

Die Abbildung 5-11 zeigt, dass Bromid (Br^-) bei sämtlichen Versuchen bis einschließlich der letzten Beprobung nachweisbar gewesen ist. Die dazugehörigen Daten sind in Tabelle A3-7 und A3-8 in Anlage 3, Blatt 3-15 bis 3-18 enthalten. Dies belegt, dass der injizierte Tracer nicht vollständig aus dem Nahbereich der Messstelle abgewandert ist. Der Konzentrationsverlauf des Bromids bei Versuchen W2123 hat innerhalb der ersten 24 Stunden um mehr als 9 $mg \cdot l^{-1}$ abgenommen und sinkt danach langsam bis zur Nachweisgrenze ab. Dieser Konzentrationsverlauf, ebenso der Anstieg von $\beta(Br^-)$ bei Versuch W2009, deuten auf technische Pannen hin: Beispielsweise kann die Konzentration des injizierten Tracers durch Diffusion innerhalb der Messstelle abgemindert worden sein, wenn der Packer den Filterbereich nicht vollständig abgedichtet hat.

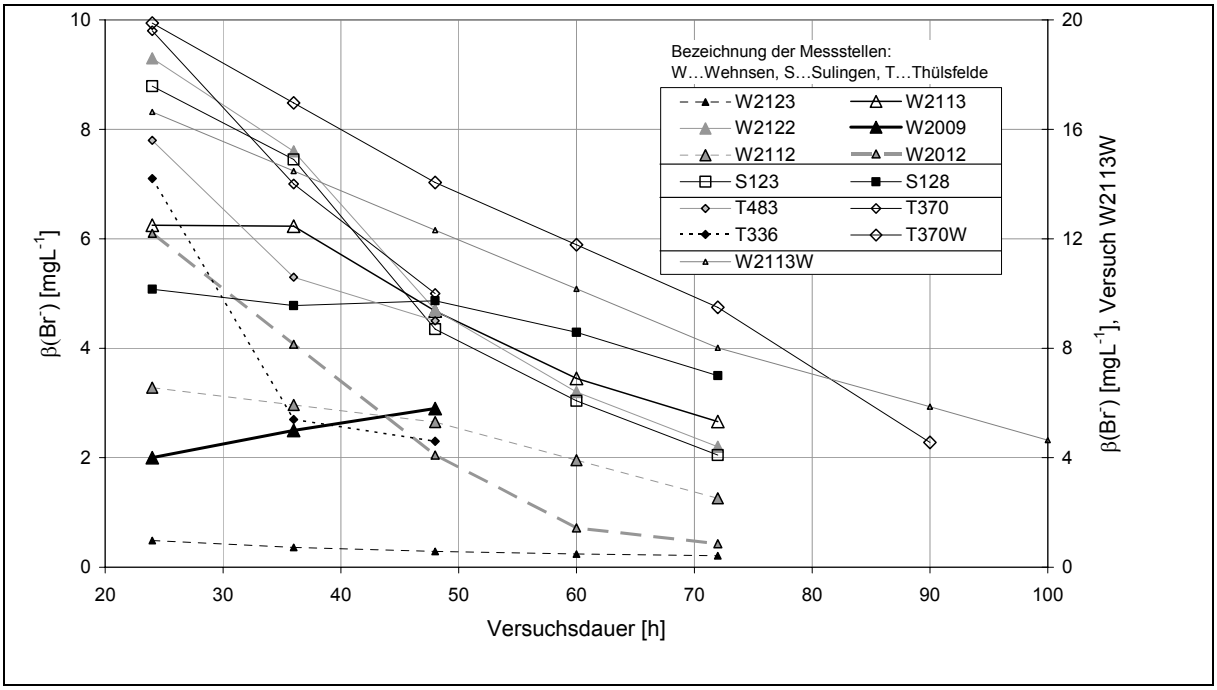


Abbildung 5-11: Gemessene Bromidkonzentrationen bei den in situ –Versuchen

Die Messwerte der Konzentration des Nitrates, dargestellt in Abbildung A3-12 in Anlage 3, Blatt 3-24, beziehungsweise in Tabelle A3-7 und A3-8 in Anlage 3, Blatt 3-15 bis 3-18 zeigen, dass Nitrat über die gesamte Versuchsdauer gegenüber der Hintergrundkonzentration im Grundwasser erhöht war. Der Nachweis einer Denitrifikation wurde demzufolge nicht durch mangelnde Gehalte an markiertem ^{15}N begrenzt. Verhält sich Bromid tatsächlich wie ein idealer Tracer, so sollte die Konzentration des Nitrates an den Messstellen, an denen Denitrifikation stattfindet, stärker zurückgehen, als die des Bromids. Eine Gegenüberstellung der relativen Konzentrationen von Nitrat und Bromid in Abbildung A3-10, Anlage 3, Blatt 3-23 zeigt allerdings an mehreren Messstellen eine völlig unerklärliche stärkere Abnahme des Bromids im Vergleich zum Nitrat. Diese sind in der Darstellung oberhalb der eingezeichneten Diagonale angesiedelt.

5.2.3.2 Bestimmung der Denitrifikation an den Tracerversuchen

Korrektur der gemessenen Konzentrationen um den Einfluss von Advektion und hydrodynamischer Dispersion

Die Abbildung 5-12 (a), (c) und (e) zeigt die jeweils die Summe der gemessenen Werte von N_2, N_2O und NO_2^- nach Gleichung (5 – 7b). In Abbildung 5-12 (b), (d) und (f) sind die, um den Einfluss von Advektion und hydrodynamischer Dispersion nach Gleichung (5 – 6) korrigierten Werte von N_2, N_2O und NO_2^- dargestellt. Die dazugehörigen Daten sind in Tabelle A3-10, Anlage 3, Blatt 3-19 enthalten. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der y-Achse in Abbildung 5-12. Auffällig ist, dass der Nitratumsatz im Gebiet Wehnsen um mindestens das 10fache größer ist als in Sulingen und Thülsfelde.

Der Konzentrationsverlauf der denitrifikativen N-Produkte ist bereits ohne Korrektur steigend. Das heißt, es wird im Bereich der meisten Messstellen über die gesamte Versuchsdauer mehr Gas produziert, als durch Transportprozesse aus dem Messstellennahbereich „abtransportiert“ wird.

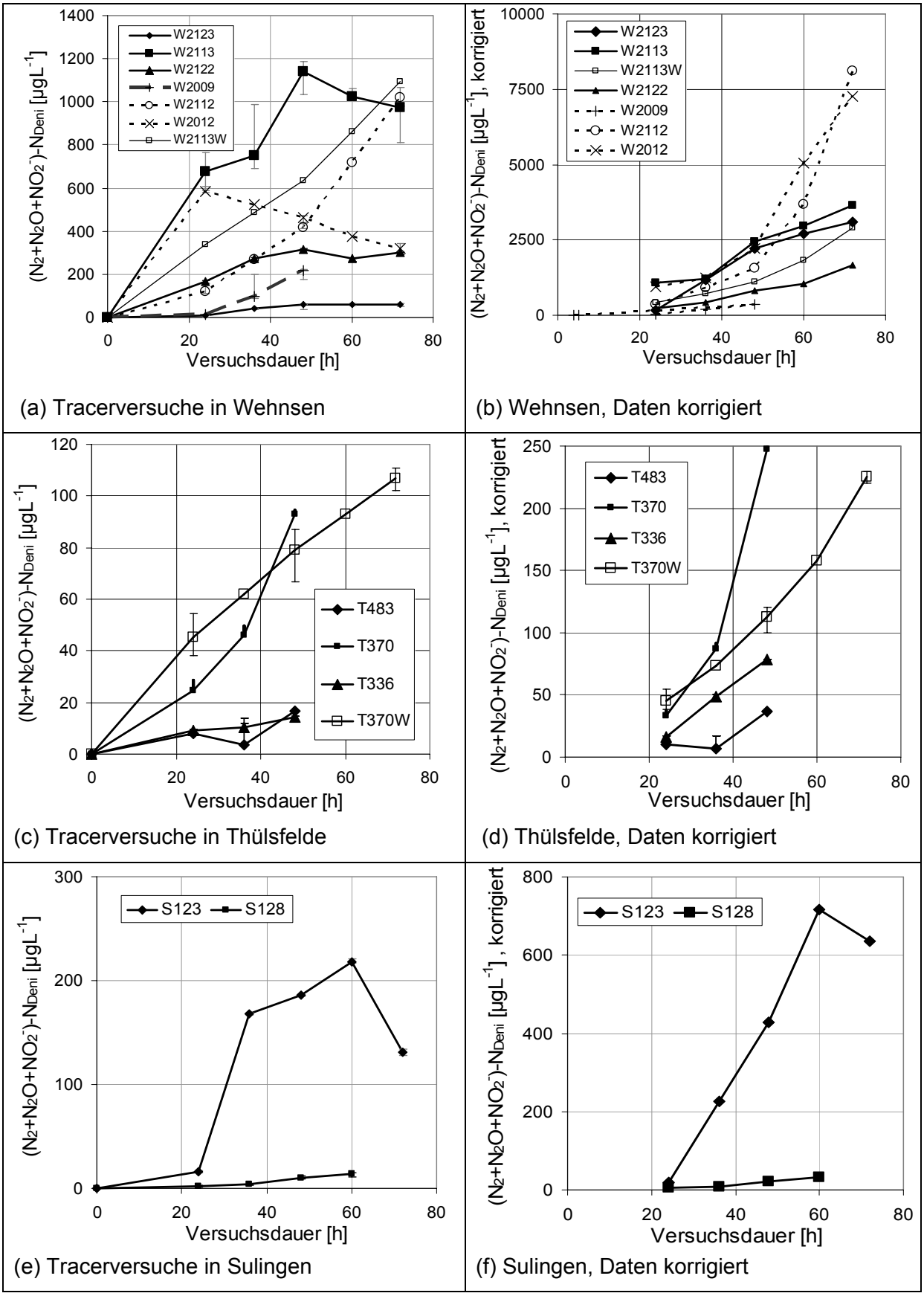


Abbildung 5-12: Gemessene und korrigierte Konzentrationen von (N_2+N_2O+NO_2^-)-N, hervorgerufen durch Denitrifikation

An sämtlichen Messstellen ist eine mit zunehmender Versuchsdauer ansteigende N-Gaskonzentration nachweisbar. Durch den Einsatz markierten Nitrats kann belegt werden, dass die Gasbildung durch Denitrifikation hervorgerufen wird. Somit wird durch die Injektion von $^{15}NO_3^-$ eine Denitrifikation im nahen Filterbereiche eine Denitrifikation provoziert, die im folgenden Abschnitt quantifiziert wird.

Quantifizierung der Denitrifikation

Die Umsatzkennwerte (λ) für Reaktionen 0. und 1. Ordnung, basierend auf den Gleichungen (5 - 7), (4 - 11) und (4 - 12), sowie die Halbwertzeiten $T_{1/2}$ sind in Tabelle 5-4 angegeben. Der Wert λ_o wurde für jeden Versuch (a) über eine Versuchsdauer von 48 h und (b) über die gesamte Versuchsdauer bestimmt. In Anlage 3, Blatt 3-19 sind die jeweiligen Ausgangsdaten enthalten. Für die Güte der Anpassung ist das Bestimmtheitsmaß (R^2) nach Pearson angegeben. Die λ-Werte sind für die Versuche in Wehnsen deutlich höher als für die Versuche, die in Sulingen und Thülsfelde durchgeführt worden sind. Auf einen Vergleich der Größenordnung der Denitrifikation wird in Kapitel 6 näher eingegangen.

Tabelle 5-4: Umsatzkennwerte λ_o und λ_1, ermittelt an den in situ – Versuchen[+]

Gebiet	Versuch	$\lambda_o^{(a)}$	$\lambda_o^{(b)}$	$R^{2(c)}$	$\lambda_1^{(a)}$	$R^{2(c)}$	$T_{1/2}^{++}$
		[mg·l^{-1}a^{-1} NO_3^-]	[mg·l^{-1}a^{-1} NO_3^-]	für λ_o	a^{-1}	für λ_1	a
Wehnsen	W2123	3313	1674 (72h)	0,99	84	0,99	0,01
Wehnsen	W2113	2192	1971 (72 h)	0,82	59	0,81	0,01
Wehnsen	W2113W	1078	3244 (100 h)	0,99	30	0,99	0,02
Wehnsen	W2122	966	891 (72 h)	0,98	19	0,97	0,04
Wehnsen	W2112	1951	4368 (72 h)	0,99	49	0,99	0,01
Wehnsen	W2012	2056	3913 (72 h)	0,92	53	0,92	0,01
Wehnsen	W2009	512	512 (48 h)	0,99	11	0,99	0,06
Sulingen	S123	660	343 (72 h)	0,99	25	0,99	0,03
Sulingen	S128	27	21 (60 h)	0,92	0,9	0,92	0,77
Thülsfelde	T483	39	39 (48 h)	0,67	0,9	0,67	0,77
Thülsfelde	T336	101	101 (48 h)	0,99	1,8	0,99	0,39
Thülsfelde	T370	345	345 (48 h)	0,92	5	0,92	0,14
Thülsfelde	T370W	109	140 (100 h)	0,99	2,7	0,99	0,26

[(a)]bezüglich einer Versuchsdauer von 48h,
[(b)]bezüglich des Wertes $D(t_{End})$, mit t_{End} … gesamte Versuchsdauer entspricht der Klammer-Angabe
[(c)]R^2…Bestimmtheitsmaß (Pearson) der Anpassung der Ausgleichsgeraden zur Bestimmung von $\lambda^{(a)}$
[+] angepasst an die Daten D(t) in Anlage 3, Tabelle A3-10
[++] Umsatzkennwert Halbwertzeit

Verteilung der N-Spezies

In Abbildung 5-13 (oben) ist der zeitliche Verlauf des Lachgasanteils der Versuche dargestellt, an denen Lachgas als Reaktionsprodukt der Denitrifikation nachgewiesen wurde. An den Versuchen W2122, W2123 und S128 wurde N_2O nicht nachgewiesen. Die Abbildung zeigt, dass N_2O bei in situ Versuchen ein quantitativ bedeutsames (Zwischen-)Produkt darstellen kann.

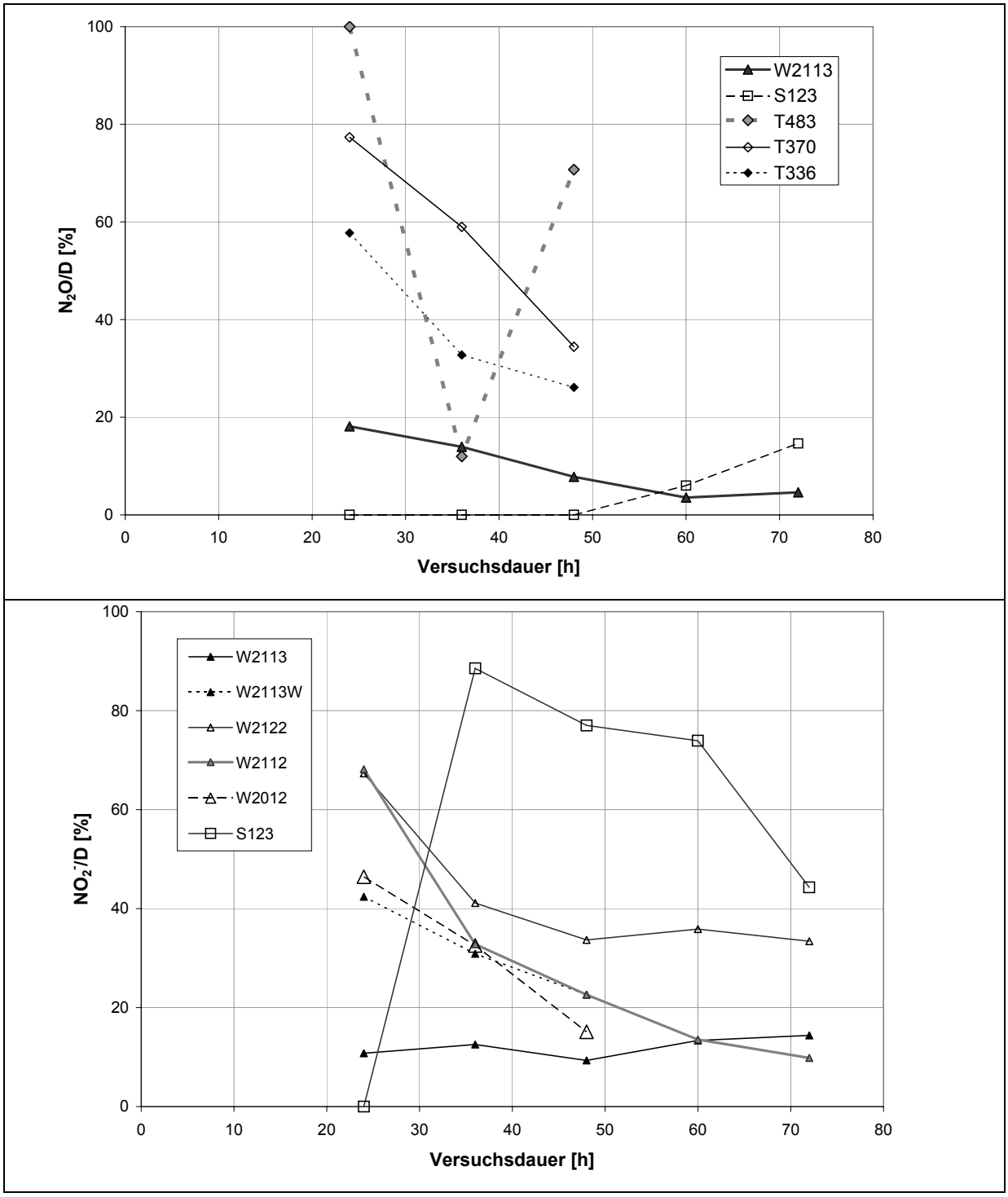


Abbildung 5-13: Zeitlicher Verlauf des Lachgasanteils (oben) und des Nitritanteils (unten) bezogen auf die Summe der Denitrifikationsprodukte D an den in situ – Versuchen

Der Anteil der Nitritkonzentration ist in Abbildung 5-13 (unten) dargestellt. Nitrit wird bei einigen Versuchen nachweisbar gebildet, wobei nicht der ^{15}N-Anteil im NO_2^- gesondert bestimmt worden ist. Da vor der Tracerinjektion an keiner der Messstellen NO_2^- nachgewiesen worden ist, wird davon ausgegangen, dass Nitrit ausschließlich aus der provozierten Denitrifikation entstanden ist. Der Anteil beträgt 24 h nach Versuchsbeginn bis zu 90% der gesamten Denitrifikation. Im weiteren Versuchsverlauf nimmt der Nitritgehalt infolge des Umsatzes zu N_2 und N_2O ab. Die nach Gleichung (5 – 6) korrigierten Ausgangswerte von $N_{2\_Deni,}$ N_2O und NO_2^- für diese Darstellung sind in Anlage 3, Blatt 3-19 enthalten. Messwerte von NH_4^+ sind in

Tabelle A3-9, Anlage 3, Blatt 3-18 enthalten. An 4 Versuchen ist ein sehr geringer Anstieg der Ammoniumkonzentration innerhalb der Versuchsdauer festzustellen. Ob das injizierte Nitrat zu NH_4^+ umgesetzt worden ist, kann nicht gesagt werden.

Art der Denitrifikation

Ein Anstieg der Sulfatkonzentration, siehe Abbildung A3-11, Anlage 3, Blatt 3-24, deutet für die Versuche in Wehnsen W2009, W2123, W2112 und W2122, sowie in Thülsfelde bei Versuch T336 auf den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation hin. Die Daten der Konzentration des Hydrogencarbonat, dargestellt in Anlage 3, Tabelle A3-7 (Blatt 3-16) und A3-8 (Blatt 3-18) zeigen für Versuch T483 in Thülsfelde einen deutlichen Anstieg, was auf den Ablauf einer chemo-organotrophen Denitrifikation hindeutet. Angesichts der hohen Hintergrundkonzentrationen an SO_4^{2-} und HCO_3^- ist kaum denkbar, dass die kurze Versuchzeit belastbare Schätzwerte für die Prozessidentifikation liefert. Für einen Nachweis der Prozessidentifikation wäre eine genauere Auswertung der Zeitkurven notwendig gewesen.

Bei Versuch W2113W wurde über die Versuchsdauer der Gehalt an gelöstem Kohlenstoff (DOC) bestimmt, siehe Abbildung 5-14. Der zu Versuchsbeginn gemessene Gehalt von 1 $mg \cdot l^{-1}$ DOC wird innerhalb von 48 h Versuchsdauer um etwa 50% verringert. Da mit der Injektion des Tracers auch Sauerstoff ins Grundwasser eingetragen worden ist, siehe Abbildung 5-10, wurde der DOC vermutlich durch O_2 oxidiert.

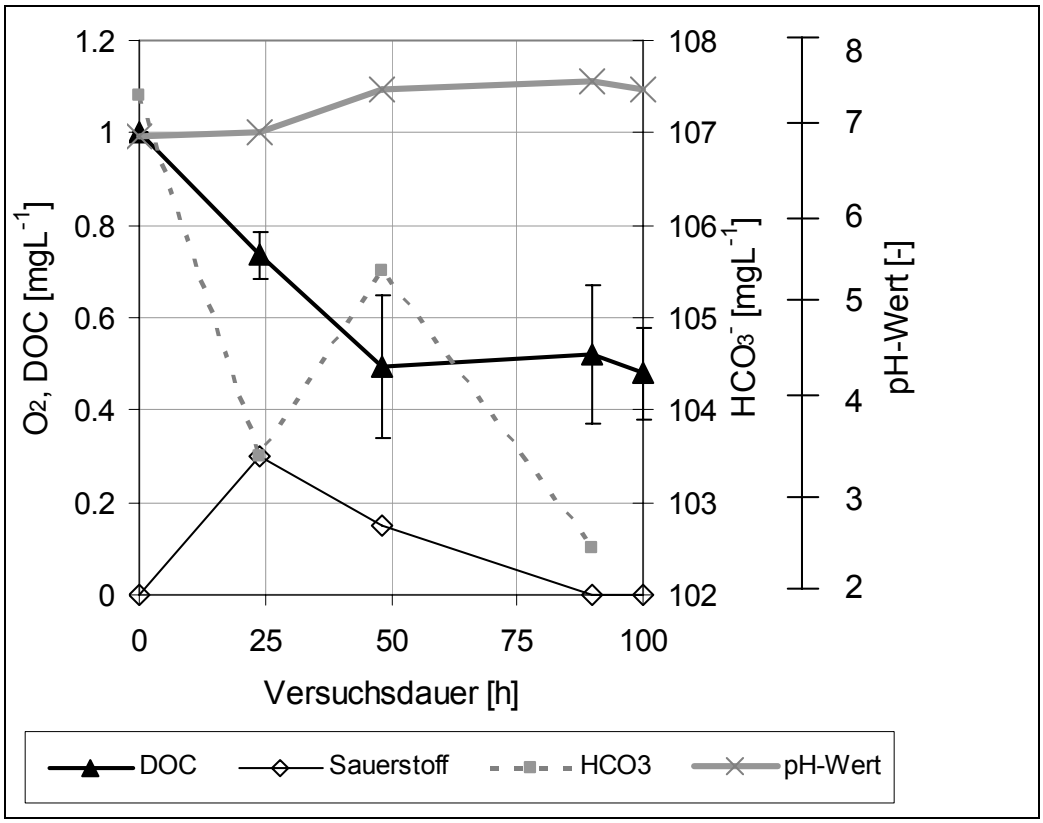


Abbildung 5-14: Gemessene DOC-Konzentrationen beim in situ –Versuch W2113W, 10/2005

Zu Beginn und am Ende der Versuche wurden die Konzentrationen von Fe_{gesamt} und Mn_{gesamt} gemessen, siehe Tabelle A3-9 (Anlage 3, Blatt 3-18). Sofern die Konzentrationen beider Parameter die Nachweisgrenze überschreiten, ist mit Ausnahme von Versuch T336, stets ein Rückgang des gelösten Gehaltes an Eisen(gesamt) und Mangan(gesamt) zu verzeichnen.

Vermutlich werden die gelösten Ionen durch den Sauerstoffeintrag infolge der Tracerinjektion, siehe Abbildung 5-10, oxidiert und fallen somit aus.

Der pH-Wert, angegeben in Anlage 3, Tabelle A3-7 (Blatt 3-16) und A3-8 (Blatt 3-17) ist, mit Ausnahme an den beiden Versuchen W2009 und W2113 in Wehnsen, vor Versuchsbeginn kleiner als 7. Dennoch ist im Verlauf bei den Versuchen im sauren Milieu sowohl ein Anstieg, als auch ein Rückgang des pH-Wertes zu beobachten. Indizien für die Art der ablaufenden Denitrifikation können somit aus dem zeitlichen Verlauf des pH-Wertes nicht abgeleitet werden.

Reproduzierbarkeit der Ergebnisse

Die Abbildung 5-15 zeigt die Denitrifikation beim Versuch W2113 und am Wiederholungsversuch W2113W an der gleichen Messstelle, sowie am Versuch T370 und dessen Wiederholungsversuch T370W. Die Größenordnung der Denitrifikation (D) stimmt jeweils überein.

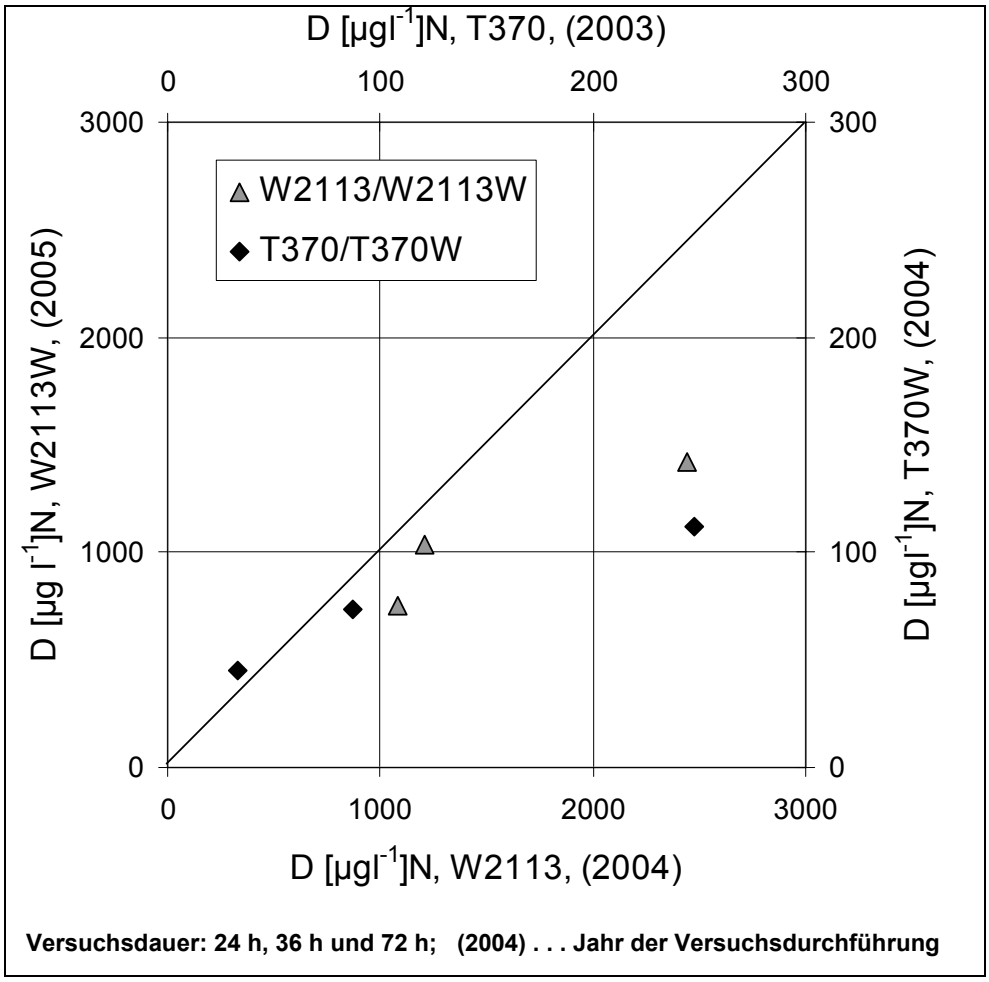


Abbildung 5-15: Denitrifikation der Versuche W2113 und T370 und der jeweiligen Versuchswiederholungen W2113W und T370W

5.2.3.3 Vergleich der Ergebnisse aus Laboruntersuchungen und Feldversuchen

Im Abschnitt 5.2.3.1, beziehungsweise mit Abbildung A3-13 in Anlage 3, Blatt 3-25, wurde dargestellt, dass aus dem zeitlichen Verlauf der Nitratkonzentration aus den Feldversuchen die NO_3^- -Elimination nicht bestimmt werden kann. Demzufolge beschränken sich die zu ver-

gleichenden Datensätze auf die N-Reaktionsprodukte $\beta(N_{2\_Deni})$, $\beta(N_2O)$ und $\beta(NO_2^-)$. Die vergleichbaren Daten von Labor- und Feldversuchen sind in Tabelle A3-11 Blatt 3-20 bis 3-22 in Anlage 3 enthalten.

Vergleich der Größe der Denitrifikation D(t)

Für einen Vergleich von Labor- und Feldversuchen ist die Angabe der Ergebnisse in einer einheitlichen Dimension notwendig. **Da die Denitrifikation, als dominierender Umsatzprozess vornehmlich am Feststoff, respektive der Feststoffoberfläche stattfindet, ist die umgesetzte Nitratmenge auf die jeweilige, zur Verfügung stehende Feststoffmasse zu beziehen.** Da für die Bereiche der Filterstrecken Bohrkerne vorlagen, konnte für diesen Teufenbereich der Gesamtporenraum n_{ges} im Labor für jeweils eine Mischprobe bestimmt werden. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5-16 mit eingefügt.

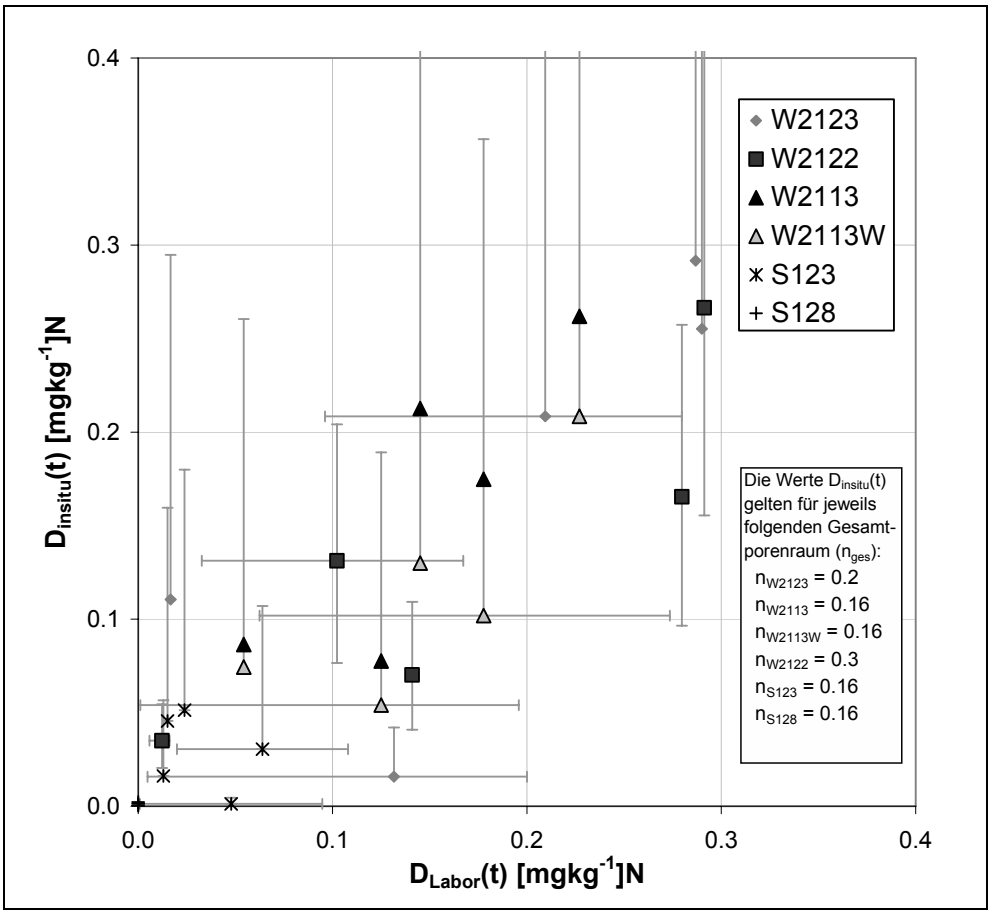


Abbildung 5-16: Denitrifikation im Labor- und Feldversuch

In Abbildung 5-16 sind die Werte für D(t) der einzelnen Labor- und Feldversuche für die unterschiedlichen Versuchsdauern einander gegenübergestellt. Die dazugehörigen Spannweiten von $D_{insitu}(t)$ entstehen durch Variation des Gesamtporenraumes n_{ges} und zeigen durch die Ausdehnung ihrer Größenordnung den starken Einfluss dieses Parameters auf das Ergebnis. Dabei wurde als maximaler Gesamtporenraum n_{ges} = 0.5 angesetzt. Die Übereinstimmung der Datensätze von Labor- und Feldversuchen wird somit auch durch den, in die Umrechnung von [mg·l^{-1}] in [mg·kg^{-1}] eingehenden Gesamtporenraum bestimmt. Durch geologische Schichtung im Teufenbereich der Filterstrecke und der damit verbundenen räumlichen Heterogenität von n_{ges}, ist diese Umrechnung mit Unsicherheiten behaftet. Die dazugehörigen Daten sind in Tabelle A3-11, Blatt 3-20 bis 3-22 in Anlage 3 enthalten. Die phäno-

menologisch hohe Übereinstimmung wird durch eine Korrelation basierend auf allen vorliegenden Daten, von r_s = 0,70, siehe Tabelle A3-12, Anlage 3, Blatt 3-22 gestützt.

Die Korrelationskoeffizienten für jeweils ein Versuchs-Paar, das heißt eines Laborversuchs mit dem dazugehörigen Feldversuch, sind in Tabelle A3-14, Anlage 3, Blatt 3-23 angegeben. Für die Versuche für den Standort Wehnsen werden mit $r_s \geq 0{,}80$ sehr hohe Koeffizienten berechnet, allerdings basieren diese auf nur fünf Datenpaaren.

Regressionsbeziehungen

In Tabelle 5-5 sind die Korrelationskoeffizienten (r_s), abgeleitete Regressionsgleichungen zur Berechnung von D_{insitu} aus D_{Labor} auf Basis einer Versuchsdauer von 72 h aus D_{insitu} angegeben. Die Feldversuche umfassen eine Versuchsdauer von wenigen Tagen und geben somit lediglich über die Anfangsphase der Denitrifikation Auskunft, sofern diese erst durch die Nitratinjektion provoziert worden ist. Um eine Abschätzung einer längerfristigen Denitrifikation, beispielsweise über mehrere Wochen vornehmen zu können, werden Gleichungen für $D_{(365d)}$ aus D_{insitu} angegeben. Die Daten für $D_{(365d)}$ wurden an Batchversuchen bestimmt. Die Gleichungen basieren auf den Ergebnissen, die für die Gebiete Wehnsen und Sulingen gewonnen worden sind. Es ist zu berücksichtigen, dass die Ausgleichsgeraden durch den Koordinatenursprung gezwungen worden sind, da ein absolutes Glied unplausibel ist. Oben wurde bereits der Einfluss des Gesamtporenraumes auf die D_{insitu}-Werte bei der Angabe in [mg·kg^{-1}] und die damit verbundenen Unsicherheiten dargestellt. Aus diesem Grunde werden in der folgenden Tabelle die Werte für D_{insitu} sowohl in [mg·kg^{-1}], als auch in [µg·l^{-1}] angegeben. Die dazugehörigen Ausgangsdaten sind in Tabelle A3-11, Anlage 3, Blatt 3-20 bis 3-22 enthalten. Für die Angabe [mg·kg^{-1}] bei den in situ –Versuchen wurde jeweils der, anhand des Sedimentes geschätzte Gesamtporenraum verwendet, der für die einzelnen Versuche in Abbildung 5-16 angegeben ist.

Tabelle 5-5: Ausgewählte Regressionsgleichungen für D_{insitu} und D_{Labor}

Bezeichnung	r_s	Gleichung	n[2)]	MAE	NRMS
D_{insitu} aus D_{Labor}[1)]	0,70**	D_{insitu}[µg·l^{-1}]N = 8981 · D_{Labor}[mg·kg^{-1}]N	24	608 [µg·l^{-1}]N	4,4 %
	0,80**	D_{insitu}[mg·kg^{-1}]N = 0,88 · D_{Labor}[mg·kg^{-1}]N	24	0,041 [mg·kg^{-1}]N	3,5 %
$D_{(365d)}$ aus D_{insitu}(t)	0,70*	$D_{(365d)}$[mg·kg^{-1}]N = 0,025 · D_{insitu}(36h) [µg·l^{-1}]N	5	8,65 [µg·l^{-1}]N	10,9 %
	0,90*	$D_{(365d)}$[mg·kg^{-1}]N = 148,3 · D_{insitu}(48h) [mg·kg^{-1}]N	5	8,227 [mg·kg^{-1}]N	8,9 %
	0,70*	$D_{(365d)}$[mg·kg^{-1}]N = 0,0126 · D_{insitu}(48h) [µg·l^{-1}]N	5	9,11 [µg·l^{-1}]N	11,5 %
	0,70*	$D_{(365d)}$[mg·kg^{-1}]N = 0,0102 · D_{insitu}(60h) [µg·l^{-1}]N	5	9,40 [µg·l^{-1}]N	11,6 %
	.98**	$D_{(365d)}$[mg·kg^{-1}]N = 86,97 · D_{insitu}(72h) [mg·kg^{-1}]N	5	9,905 [mg·kg^{-1}]N	12,3 %

[1)]basierend auf einer Versuchsdauer von 72 h, [2)]Anzahl der Datenpaare
*Die Korrelation ist auf dem Niveau 0.01 signifikant (zweiseitig)
**Die Korrelation ist auf dem Niveau 0.05 signifikant (zweiseitig)

Abschätzung des Gehaltes an Reduktionsmitteln aus der Denitrifikation bei situ – Versuchen

Von hoher praktischer Relevanz ist die Abschätzung von Reduktionsmitteln mit in situ - Versuchen. In Tabelle A3-13 in Anlage 3, Blatt 3-22 sind die Korrelationskoeffizienten (r_s) zwischen Denitrifikation am in situ-Versuch, $D_{insitu}(t)$ und den Gehalten von TOC und Sulfid-S im Teufen-Bereich der Filterstrecke, an denen die in situ-Versuche durchgeführt worden sind, dargestellt. Zwischen D_{insitu} und dem Sulfid-Gehalt werden signifikante Korrelationen mit $r_s \geq 0{,}9$ berechnet. Ein Zusammenhang zwischen $D_{insitu}(t)$ und dem TOC-Gehalt ist weniger stark und kann nicht mit signifikanten Korrelationen belegt werden.

Eine Quantifizierung dieser Zusammenhänge über Regressionen ist in Tabelle 5-6 dargestellt, aber aufgrund der wenigen Datenpaare (n = 5) unsicher. Die Regressionsgerade weißt ein absolutes Glied auf. Dieses suggeriert, dass Denitrifikation am Feldversuch erst ab einem Mindestgehalt von etwa > 600 $mg \cdot kg^{-1}$ Sulfid-S gemessen werden kann. Da dies nicht unplausibel ist, wurde das absolute Glied in der Gleichung belassen.

Tabelle 5-6: Regressionsgleichungen zwischen $D_{insitu}(t)$ und den Gehalten an TOC und Sulfid-S

Parameter	r_S	Gleichung	MAE	NRMS
D_{in_situ}(36h)-TOC	0,67	TOC[$mg \cdot kg^{-1}$] = 1,493 · D_{in_situ}(36h)[$\mu g \cdot l^{-1}$]N + 522	684 [$mg \cdot kg^{-1}$]	12,6 %
D_{in_situ}(48h)-TOC	0,67	TOC[$mg \cdot kg^{-1}$] = 0,714 · D_{in_situ}(48h)[$\mu g \cdot l^{-1}$]N + 589	727 [$mg \cdot kg^{-1}$]	13,6 %
D_{in_situ}(60h)-TOC	0,67	TOC[$mg \cdot kg^{-1}$] = 0,595 · D_{in_situ}(60h)[$\mu g \cdot l^{-1}$]N + 547	736 [$mg \cdot kg^{-1}$]	13,5 %
D_{in_situ}(24h)-Sulfid-S	0,99**	Sulfid-S[$mg \cdot kg^{-1}$] = 1,395 · D_{in_situ}(48h)[$\mu g \cdot l^{-1}$]N + 826	260 [$mg \cdot kg^{-1}$]	9,5 %
D_{in_situ}(36h)-Sulfid-S	0,90*	Sulfid-S[$mg \cdot kg^{-1}$] = 0,509 · D_{in_situ}(48h)[$\mu g \cdot l^{-1}$]N + 645	375 [$mg \cdot kg^{-1}$]	11,7 %
D_{in_situ}(48h)-Sulfid-S	0,90*	Sulfid-S[$mg \cdot kg^{-1}$] = 0,509 · D_{in_situ}(36h)[$\mu g \cdot l^{-1}$]N + 639	360 [$mg \cdot kg^{-1}$]	11,3 %
D_{in_situ}(60h)-Sulfid-S	0,90*	Sulfid-S[$mg \cdot kg^{-1}$] = 0,509 · D_{in_situ}(60h)[$\mu g \cdot l^{-1}$]N + 609	369 [$mg \cdot kg^{-1}$]	11,3 %

*Die Korrelation ist auf dem Niveau 0,01 signifikant (zweiseitig)
**Die Korrelation ist auf dem Niveau 0,05 signifikant (zweiseitig)

5.2.4 Diskussion und Bewertung

In den drei Untersuchungsgebieten wurden in situ oder Einbohrloch-Tracerversuche der Literatur an einzelnen Messstellen erfolgreich durchgeführt: (a) Mit der Injektion des Tarcers wurde die Sauerstoffkonzentration im Grundwasser nicht über 5 $mg \cdot l^{-1}$ erhöht, so dass kein ausschließlich oxidierendes Milieu geschaffen wurde, welches eine Denitrifikation verhindert hätte. (b) Die injizierte Tracermenge von 100 l bzw. 200 l war für eine Versuchsdauer von maximal 72 h ausreichend, so dass markiertes Nitrat innerhalb dieses Zeitraumes im Überschuss vorlag. (c) Anhand der Messung markierter N-Gase konnte der Ablauf von Denitrifikation, provoziert durch Tracerinjektion, im Nahbereich der Filterstrecke der jeweiligen Messstelle nachgewiesen werden. Die Messung der NO_3^- - Konzentration, wie beispielsweise von TRUDELL et al. (1986) praktiziert, lieferte hier keine verwertbaren Ergebnisse: Der zeitliche Verlauf der korrigierten Nitratkonzentration, dargestellt in Abbildung A3-13, Anlage 3, Blatt 3-

25, zeigt für einige Versuche einen Anstieg. Dieser Konzentrationsanstieg des Nitrates ist bei gleichzeitig stattfindender Denitrifikation nicht plausibel und kann nicht erklärt werden. Daraus muss geschlossen werden, dass zur Bestimmung des N-Umsatzes bei dieser Art der Versuchsdurchführung nicht die Nitratkonzentration, sondern lediglich die Konzentrationen von $N_{2(Deni)}$, N_2O und NO_2^-, verwendet werden können. Eine Differenzierung in Nitratelimination und Denitrifikation, wie sie bei den Batchversuchen angewendet wurde, ist deshalb für die Feldversuche nicht möglich gewesen.

Die gemessenen Konzentrationen von N_{2_Deni}, N_2O und, sofern durch Denitrifikation gebildet, auch NO_2^-, wurden um den Einfluss von Advektion und hydrodynamischer Dispersion mittels der Br^- - Konzentration korrigiert. Die Ergebnisse für $D_{insitu}(t)$ auf der Basis von Gleichung (5 – 7b), dargestellt in Abbildung 5-12, zeigen für die drei Untersuchungsgebiete deutliche Unterschiede in der Größe des N-Umsatzes: Die Tracerversuche, die im Gebiet Wehnsen durchgeführt worden sind, zeigen eine deutlich stärkere Denitrifikation, als die Versuche in den Gebieten Thülsfelde und Sulingen. Ein weiterführender Vergleich der drei Gebiete hinsichtlich Denitrifikation wird im Kapitel 6 durchgeführt. An dieser Stelle werden in Tabelle 5-7 die Ergebnisse Literaturwerten gegenübergestellt. Da in der Literatur λ_o angegeben werden, werden auch für die untersuchten Grundwasserleiter die entsprechenden Werte aus Tabelle 5-4 verwendet. Ergebnisse von Einbohrloch-Tracerversuche liegen hauptsächlich für das oberflächennahe Grundwasser, das heißt wenige Meter unter Druckspiegel vor. Die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse liegen in der gleichen Größenordnung wie die dargestellten Ergebnisse aus der Literatur.

Tabelle 5-7: Ergebnisse der Anwendung von Einbohrloch-Tracerversuchen

Untersuchungsgebiet oder Quellenangabe	Teufe	Versuchs-dauer	Spannweiten für λ_o
Wehnsen	20 – 32[1)]	72 h	1,4 – 12,0 [$mg \cdot l^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^- *0,2 – 1,5 [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^-
Sulingen	9 – 11[1)]	60 h – 72 h	0,06 – 0,94 [$mg \cdot l^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^- *0,01 – 0,12 [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^-
Thülsfelde	3 – 16[1)]	48 h	0,11 – 0,95 [$mg \cdot l^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^- *0,01 – 0,12 [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^-
ADDY et al. (2002)	1[1)]	72 h	0,2 - 0,8 [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^-
SÁNCHEZ-PÉREZ et al. (2003)	3 –12[2)]	4 h	0,6 - 210 [$mg \cdot l^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^-
TRUDELL et al. (1986)	2[1)]	18 d	0,8 - 13,8 [$mg \cdot l^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^-
WELL et al. (2003)	0,15 – 2,2[2)]	24 h	0,004 – 12,4 [$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$] NO_3^-

[1)] m u Grundwasserspiegel, [2)] m u GOK, *Umrechnung nach Gleichung (5 – 8) mit n = 0,25

Die Messwerte der Feldversuche zeigen die quantitative Bedeutung der Lachgas- und Nitritbildung in der Anfangsphase der Denitrifikation (≤ 72 h Versuchsdauer), siehe Tabelle A3-11, Anlage 3, Blatt 3-20 bis 3-22. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass keine $^{15}NO_2^-$ - Analysen durchgeführt worden sind und die Bestimmungsgrenze für Nitrit bei der angewendeten Analytik bei 20 $\mu g \cdot l^{-1}$ liegt.

Die Ergebnisse von 2 Feldversuchen zum N-Umsatz konnten bei den Wiederholungsversuchen, zeitversetzt um etwa 1 Jahr, in ihrer Größenordnung wieder gefunden werden, siehe Abbildung 5-15.

Verglichen mit den λ_o-Werten aus der N_2/Ar-Messung, siehe Tabelle A3-4, Anlage 3, Blatt 3-11, sind die Ergebnisse aus den in situ -Versuchen um etwa das 100 bis 1000fache höher. Neben den Unsicherheiten der Ergebnisse von Gasmessung und Altersdatierung ist einerseits zu berücksichtigen, dass das N_2/Ar-Verhältnis die tatsächlich ablaufende Denitrifikation beschreibt, wohingegen mit dem Tracerversuch die potentiell mögliche Denitrifikation bei Nitratzufuhr erfasst wird, sofern im Nahbereich der Messstelle üblicherweise kein Nitrat vorhanden ist. Andererseits stellt die Überschuss-N_2-Messung einen integralen Wert der Prozesse über die gesamte Fließbahn, beziehungsweise -zeit, entsprechend der Altersdatierung, dar. Darin eingeschlossen ist die Passage durch das oxidierende Milieu und durch reduktionsmittelarme Zonen, in denen nur eine geringe Denitrifikation abläuft. Höhere Denitrifikationsraten aus in situ-Versuchen gegenüber N_2/Ar-Messungen mit Altersdatierung zeigen auch die Literaturwerte in PUCKETT & COWDERY (2002).

Der durchgeführte Vergleich von Feld- und Batchversuchen zeigt mit einem Korrelationskoeffizienten r_s = 0,70, siehe Tabelle A3-12, Anlage 3, Blatt 3-22, eine hohe Übereinstimmung der Größenordnung der Denitrifikation. Einbohrloch-Tracerversuche mit $^{15}NO_3^-/Br^-$ - Injektion und anschließender Gasmessung liefern demnach mit Laborversuchen vergleichbare Ergebnisse. Unsicher ist der Bezug der Masse von gebildetem N_{2_Deni}, N_2O und NO_2^- auf die Feststoffmasse, das heißt die Umrechnung von [mg·l^{-1}] auf [mg·kg^{-1}]:

(1) Denitrifikation findet vornehmlich an der Kontaktfläche zwischen Reduktionsmittel (fest) und gelöstem Nitrat (flüssig) statt. Das injizierte Wasser füllt den nutzbaren Porenraum n_e aus. Es ist aber von einem Konzentrationsausgleich zwischen mobilem und Haftwasser durch Diffusion auszugehen. Die Größe der Kontaktfläche ist unbekannt. Es wird eine direkte Proportionalität zwischen Kontaktfläche und Gesamtporenraum vorausgesetzt, siehe MATTHEß & UBELL (1983), die aber aufgrund kleinräumiger Heterogenität nicht gegeben sein muss.

(2) Die Größe des Gesamtporenraums ist meist unbekannt. Somit kann die umgesetzte Nitratmenge oft nur auf eine geschätzte Feststoffmasse bezogen werden und die Umrechnung von [mg·l^{-1}] auf [mg·kg^{-1}] basiert deshalb auf Schätzwerten.

Für die hier durchgeführten in situ Versuche wurde der Gehalt der gebildeten N-Produkte unter Annahme möglicher, unterschiedlicher Werte für den Gesamtporenraum auf die Feststoffmasse bezogen. Die Ergebnisse, dargestellt in Abbildung 5-16, liefern sehr hohe Spannweiten und zeigen somit den hohen Einfluss des Parameters Porenraum. Bei der in Tabelle 5-5 angegebenen Regressionsgleichung wird die Denitrifikation im Labor für 72 h Versuchsdauer mit dem Faktor 0,88 multipliziert, um den entsprechenden in situ - Wert der Denitrifikation zu bestimmen. Das heißt, die Denitrifikation im Labor ist höher als beim in situ - Versuch. In Anbetracht der Versuchszahl und der möglichen Spannweiten für den Gesamtporenraum und die daraus resultierenden Spannweiten für D(t) [mg·kg^{-1}] N, ist die angegebene Regressionsgleichung unsicher. Um die Spannweiten von n_{ges} berücksichtigen zu können, sollten entsprechende Regressionsgleichungen berechnet werden.

Die Größenordnung der N_2O- und NO_2^- - Anteile an D_{insitu} sind mit bis zu 90 % so bedeutend, dass eine Messung beider Komponenten unbedingt erfolgen muss. Es ist kein Zusammenhang zwischen der N_2O- und NO_2^- - Bildung im Labor- und Feldversuch zu erkennen: Lach-

gas- oder Nitritbildung können im Feldversuch auftreten und im Laborversuch nicht nachgewiesen werden, als auch umgekehrt. Das heißt, die Art der N-Reaktionsprodukte wird von Faktoren bestimmt, die für Feld- und Laborversuche im vorliegenden Fall nicht übereinstimmen.

Ist der Nahbereich der Filterstrecke hydraulisch heterogen, so wird durch die bevorzugte Ausbreitung des Tracers in hydraulisch aktiven Bereichen ebenda auch die Denitrifikation stattfinden. Ist der Reduktionsmittelgehalt in nicht-bindigem Sediment geringer als in bindigem, dann sind die Ergebnisse nur bedingt mit Batchversuchen vergleichbar: Beim Batchversuch wird durch das locker liegende Sediment ein Kontakt der Versuchslösung mit bindigem und nicht-bindigem Material gewährleistet. Somit kann im Laborversuch ein höherer N-Umsatz erzielt werden. Für die Wassergüte ist der N-Umsatz in hydraulisch aktiven Bereichen bedeutend, der mit den in situ-Versuchen besser erfasst wird, als mit Laborversuchen.

Zwischen der Denitrifikation beim in situ -Versuch, D_{insitu}, und den Gehalten an Reduktionsmitteln, besonders dem Sulfidgehalt, werden anhand von jeweils 5 Datenpaaren enge Zusammenhänge gefunden, siehe Tabelle A3-13, Anlage 3, Blatt 3-22. Die angegebenen Regressionsgleichungen, siehe Tabelle 5-6 basieren auf jeweils 5 Werten und ergeben Fehler (NRMS) von > 10 %. Das heißt, die aufgestellten Regressionsgleichungen müssen durch weitere Daten verbessert werden. Um den Gehalt an Reduktionsmitteln mit Einbohrloch-Tracerversuchen sicher abschätzen zu können, muss die Datenbasis durch weitere Versuche, beispielsweise im Zuge des Neubaus von Messstellen, verdichtet werden.

Die angewendete Technik ist geeignet, Feldversuche in dieser Form an bestehenden Vorfeldmessstellen durchzuführen. Wird markiertes Nitrat eingesetzt, sollten neben den beiden N-Gasen N_2 und N_2O auch die möglichen Reaktionsprodukte des N-Umsatzes NO_2^- und NH_4^+ gemessen werden. Insbesondere bei vorhandenem Hintergrundgehalt an Nitrat sollte auch $^{15}NO_2^-$ und $^{15}NH_4^+$ gemessen werden. Es wird deutlich, dass unter den hier gegebenen Voraussetzungen, Tracerkonzentration und Versuchsdauer, eine Bestimmung der Nitratelimination in situ anhand der Konzentration des NO_3^- nicht möglich ist. Die Abbildung 5-12 macht deutlich, dass für in situ – Versuche die Messung der N-Reaktionsprodukte aussagekräftiger sind als der Konzentrationsverlauf des Nitrates, siehe Abbildung A3-12 und A3-13, Anlage 3, Blatt 3-24 und 3-25.

Eine Kontrolle des gelösten O_2-Gehaltes ist notwendig, um zu prüfen, ob der Ablauf von Denitrifikation behindert werden kann. Eine $^{15}NO_3^-$ - Analyse besonders bei vorhandenem Hintergrundgehalt an Nitrat ist zu empfehlen, um sicherzustellen, dass markiertes Nitrat bis zum Versuchende im Überschuss vorliegt. Der Zeitabstand der Probenahmen von 12 Stunden erwies sich als geeignet, da innerhalb dieses Zeitraumes Veränderungen (Erhöhung) der N-Denitrifikationsprodukte festgestellt werden konnten. Zu empfehlen ist in jedem Fall eine längere Versuchsdauer und ein entsprechen höheres Injektionsvolumen.

6 Vergleichende Bewertung der Denitrifikation in den drei untersuchten Grundwasserleitern

6.1 Ziele

In der vorliegenden Arbeit standen für die Abschätzung der Umsatzprozesse im Grundwasserleiter, speziell der Denitrifikation, die Ergebnisse zahlreicher Punktmessungen zur Verfügung. Diese Ergebnisse zeigen eine heterogene Verteilung von N- Umsatzkennwerten und des Gehaltes an Reduktionsmitteln. Ein Ziel der vorliegenden Arbeit war es, zu prüfen, inwieweit ein Grundwasserleiter anhand der Ergebnisse der Feld- und Laboruntersuchungen hinsichtlich der aktuellen beziehungsweise potentiell möglichen Denitrifikation charakterisiert werden kann. Dazu sollten die Ergebnisse, beziehungsweise deren Mittelwerte, die aus Feld- und Laboruntersuchungen für die Gebiete Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde[1] gewonnen wurden, miteinander verglichen werden. Folgende Arbeitshypothese sollte geprüft werden: Die relative Größe der Denitrifikation für jedes Gebiet spiegelt sich in den Ergebnissen aus der Anwendung der einzelnen Untersuchungsmethoden wider. Das heißt, wenn beispielsweise die durchschnittliche Nitratelimination der Batchversuche am Material aus Wehnsen verglichen zu den beiden anderen Gebieten hoch ist, sollte auch die durchschnittliche Denitrifikation der Tracerversuche vergleichsweise hoch sein. Da eine solche Bewertung auf einem Vergleich verschiedener Gebiete basiert, wird von einer relativen Größe, beziehungsweise relativen Bewertung gesprochen.

6.2 Methoden und Vorgehensweise

Für die hydrogeologische Praxis ist eine Typisierung der Grundwasserleiter hinsichtlich der Größe des N-Umsatzes für die wasserwirtschaftliche Planung notwendig. Einige Arbeiten liegen dazu vor, beispielsweise WENDLAND (1999), SCHÄFER & WENDLAND (2005). Deren Ziel war eine Kartierung der Denitrifikation im oberflächennahen Bereich des Untergrundes. In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich der wassergesättigte Bereich betrachtet. Eine Abschätzung von Umsatzprozessen anhand von Standortcharakteristika, wie Entstehungsgeschichte, Sedimentstruktur oder geographische Lage ist zwar anstrebenswert, aber auf der Basis von drei, in dieser Hinsicht sehr ähnlichen, Gebieten kaum möglich.

<u>Zu vergleichende Parameter</u>

Für die drei Untersuchungsgebiete Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde lagen Ergebnisse (a) der Gasmessungen (N_2/Ar) an Vorfeldmessstellen, (b) der Tracerversuche an Vorfeldmessstellen, (c) der Analysen von Gehalten an Reduktionsmitteln einzelner Bohrstandorte und (d) von Batchversuchen zum N-Umsatz vor. Folgende Parameter der einzelnen Gebiete wurden jeweils miteinander verglichen:

- Ergebnisse der Gasmessungen, $\beta(N_2O+N_{2(Deni)})$, als Kennwerte für die tatsächlich ablaufende Denitrifikation im Grundwasserleiter

[1] In diesem Kapitel werden ausschließlich Ergebnisse der Fassung A berücksichtigt. Aussagen zum Gesamt-Einzugsgebiet können hier nicht getroffen werden, da für die Fassungen B bis F nur einzelne Ergebnisse der N_2/Ar-Messungen vorliegen, aber keinerlei Tracer- oder Laboruntersuchungen durchgeführt worden sind.

- Ergebnisse, D_{insitu}(48h), von Tracerversuchen als Punktinformation der Denitrifkation im Grundwasserleiter
- Der Gehalt des Reduktionsmittels Sulfidschwefel
  Dieser steht im Zusammenhang mit der stöchiometrisch möglichen Größe des N-Umsatzes in Form einer chemo-lithotrophen Denitrifikation.
- Der Nitratumsatz im Batchversuch, ausgedrückt durch E(84d), E(365d), λ_o und λ_1
  Diese Kennwerte beschreiben die ablaufende Nitratelimination bei ständigem Nitratüberschuss unter Laborbedingungen, siehe Kapitel 4.2. Es ist davon auszugehen, dass die Denitrifikation den quantitativ wirksamsten N-Umsatzprozess darstellt. Ein Vergleich der Kennwerte D(t) war nicht möglich, da an den Batchversuchen an Proben aus Thülsfelde keine N_2/Ar-Messungen vorgenommen worden sind.

Aus den Daten für jedes Gebiet wurden jeweils für die unterschiedlichen Untersuchungen Mittelwerte gebildet. Allerdings ist eine pauschale Bewertung solcher Mittelwerte lückenhaft, da:

- Die Messwerte, aus denen ein Mittelwert gebildet wurde, für unterschiedliche hydraulische und hydrogeochemische Milieus bestimmt worden sind.
- Für die einzelnen Gebiete eine unterschiedlich umfangreiche Datenbasis vorhanden war.

Zuordnung der Messdaten

Um Daten ähnlichen Milieus zu vergleichen, wurde eine Unterteilung in vornehmlich oxidierendes und vornehmlich reduzierendes Milieu für jedes Gebiet vorgenommen. Dies war notwendig, da die Reduktionsmittel in beiden Milieus unterschiedlich intensiv oxidiert und somit aufgebraucht werden können. Die Milieugrenzen wurden auf der Basis der Wasserbeschaffenheitsdaten wie im Kapitel 5.1 beschrieben gezogen. Weiterhin wurden nur Daten hydraulisch aktiver Bereiche ($K \geq 10^{-6}$ m·s^{-1}) herangezogen. Daten von Proben aus hydraulisch passiven Bereichen wurden hier nicht mit berücksichtigt, da das Interesse der Denitrifikation dem Grundwasser leitenden Bereich gilt. Die jeweilige Datenanzahl ist in Tabelle 6-1, getrennt nach vornehmlich reduzierendem und oxidierendem Milieu, angegeben. Die verwendeten Daten sind in den Tabellen A4-1 und A4-2 in Anlage 4, Blatt 4-1 bis 4-3 enthalten.

Tabelle 6-1: Vorhandene Anzahl von Daten für eine vergleichende Bewertung

	Untersuchungen im Feld		**Anzahl der Untersuchungen im Labor**			
Aquifer	**Anzahl der (N_2/Ar)-Messungen**	**Anzahl der Tracer-versuche**	**Reduktionsmittel**			**Batch-versuche[7)]**
			Glühv.[9)]	**TOC**	**S_2^{2-}**	
Wehnsen[1)]	**10**[4)] + **11**[5)]	**6**[4)]	**40**[4)] + **5**[5)]	**64**[4)]+**27**[5)]	**41**[4)] + **5**[5)]	**17**[4)] + **2**[5)]
Sulingen[2)]	**4**[4),6)] + **3**[5),6)]	**2**[4)]	**8**[4)] + **21**[5)]	**8**[4)] + **21**[5)]	**3**[4)] + **1**[5)]	**2**[4)] + **2**[5)]
Thülsfelde[3)]	**9**[4),6)] + **9**[5),6)]	**2**[4)] + **1**[5)]	**3**[4)] + **5**[5)]	**5**[4)] + **3**[5)]	**4**[4)]	**7**[4),8)] +**2**[5),8)]

[1)]Einzugsgebiet der Brunnen F5 und F6, [2)]Einzugsgebiet der westl. Fassung, [3)]Fassung A, [4)]vorwiegend reduzierendes Milieu, [5)]vorwiegend oxidierendes Milieu, [6)]z.T. ohne N_2O-Messungen, [7)]λ und E(365d), [8)]Daten aus PÄTSCH (2006), [9)]Untersuchungen an Kernproben; für Spülproben Anlage 4, Blatt 4-2 und 4-3

6.3 Ergebnisse

Die Mittelwerte und Standardabweichungen für die Ergebnisse der angewendeten Methoden sind, basierend auf den Daten in Tabelle A4-1 und A4-2 in Anlage 4, Blatt 4-1 bis Blatt 4-3, in Tabelle 6-2 enthalten. Darin angegeben sind sowohl Werte, die für den kompletten Datensatz eines Aquifers gewonnen wurden, als auch Werte, die jeweils ausschließlich für den vornehmlich reduzierenden Bereich des Aquifers gelten. Die Parameter E(t) und λ für das Gebiet Thülsfelde sind nur sehr eingeschränkt mit den entsprechenden Daten für Versuche am Sediment aus Wehnsen und Sulingen vergleichbar, da Aufbau und Durchführung der Laborversuche unterschiedlich gewesen ist, siehe PÄTSCH (2006).

Tabelle 6-2: Mittelwerte der Ergebnisse angewendeter Methoden für die 3 Grundwasserleiter

Aquifer / Methode	Wehnsen	Sulingen	Thülsfelde	
Gasmessungen $N_2O+N_{2\_exc}$	4,8 (± 3,7) [7,0 (± 3,0)]	5,9 (± 5,0) [9,1 (± 3,9)]	6,1 (± 6,1) [7,5 (± 7,4)]	[mg·l^{-1}] N
Tracerversuche D_{insitu}(48h)	[1642 (± 938)]	[224 (± 284)]	121 (± 112) [163 (± 120)]	[µg·l^{-1}] N
Sulfidgehalt	1228 (± 1404) [1367 (± 1427)]	325 (± 301) [403 (± 315)]	1237 (± 1110)[1)]	[mg·kg^{-1}]
E(84d)	- 8,0 (± 6,3) [- 9,0 (± 6,4)]	- 2,5 (± 1,9) [- 3,3 (± 1,2)]	- 9,1 (± 6,8)[1)] [-10,9 (± 6,4)][1)]	[mg·kg^{-1}] N
E(365d)	-39 (± 37,7) [-44 (± 37,7)]	-5,8 (± 4,2) [-5,3 (± 5,0)]	- 39,5 (± 29,5)[1)] [- 47,3 (± 28,0)][1)]	[mg·kg^{-1}] N
λ_1	5,5 (± 6,0) [6,19 (± 6,0)]	0,26 (± 0,26) [0,25 (± 0,21)]	4,35 (± 5,58)[1)] [5,58 (± 5,76)][1)]	[a^{-1}]
λ_o	0,08 (± 0,07) [0,09 (± 0,06)]	0,01 (± 0,01) [-0,01 (± 0,01)]	0,11 (± 0,08)[1)] [0,13 (± 0,08)][1)]	[mg·kg^{-1}·h^{-1}] N

Anmerkung: angegeben ist der Mittelwert für den gesamten Datensatz, (± Standardabweichung), Daten der eckigen Klammer gelten für vornehmliches reduzierendes Milieu, Anzahl n der zu Grund liegenden Werte, siehe Tabelle 6-1, [1)]SGM-Bohrung nach PÄTSCH (2006)

Schwierig war es ebenfalls, die Gasgehalte im Grundwasser zu vergleichen, da diese unter anderem von den unbekannten Faktoren Fließweglänge im oxidierenden und reduzierenden Milieu, sowie dem verfügbaren Nitrat abhängig sind. Ersichtlich ist, dass die angegebenen Mittelwerte der Gasgehalte für Sulingen und Thülsfelde größer sind, als für Wehnsen, wenn sowohl das oxidierende als auch das reduzierende Milieu betrachtet werden. Die Ergebnisse der angewendeten Tarcerversuche zeigen hingegen für Wehnsen deutlich höhere Werte, als für Sulingen und Thülsfelde.

Die Mittelwerte der Ergebnisse aus den Untersuchungen im Labor zeigen eine ähnliche Größenordnung für Wehnsen und Thülsfelde und deutlich geringere Werte am untersuchten Sediment aus Sulingen. Dies gilt sowohl für den Gehalt an Sulfidschwefel, als auch für die ausgewählten Ergebnisse der Batchversuche.

Die Ergebnisse der mit dem Kolmogrov-Smirnov-Test auf Normalverteilung geprüften Reihen von Glühverlust, TOC- und Sulfidgehalt, Parameter der Kinetik und der N_2/Ar-Messungen im Feld, sind in Anlage 4, Tabelle A4-3 und A4-4 (Blatt 4-4) enthalten. Die Ergebnisse zeigen, in Abhängigkeit der angegebenen Irrtumswahrscheinlichkeit, dass eine Normalverteilung bzw. Lognormalverteilung für die Parameter abgesichert werden kann.

6.4 Diskussion und Bewertung

In Tabelle 6-2 sind die Mittelwerte aus den Ergebnissen für die Anwendung unterschiedlicher Untersuchungsmethoden in den Gebieten Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde enthalten. Die Ergebnisse lassen folgende Schlüsse zu:

- **Die Ergebnisse der unterschiedlichen Laboruntersuchungen sind untereinander plausibel. Das heißt, niedrige Gehalte an Reduktionsmitteln gehen mit einer geringen Nitratelimination und geringen Kennwerten λ einher**: An Proben aus Wehnsen und Thülsfelde wird im Batchversuch durchschnittlich etwa die gleiche Nitratmenge umgesetzt. Für Proben aus Sulingen hingegen ist die Masse eliminierten Nitrates deutlich geringer. Daran wird deutlich, dass der Nitratumsatz im Laborversuch hauptsächlich durch den Gehalt an Sulfidschwefel bestimmt wird. Für die Parameter E(365d) und λ_o ergeben sich Unterscheide zwischen den Werten für Sulingen und Thülsfelde.
- **Die Ergebnisse der N_2/Ar-Messungen sind nicht mit den Resultaten aus Laboruntersuchungen und Tracerversuchen vergleichbar.** Die Messungen der Gaskonzentratration ergaben für Wehnsen einen signifikant niedrigeren Wert, als für die Ergebnisse der Messungen in Sulingen und Thülsfelde. Für Tracerversuche und Laboruntersuchungen wurden für Wehnsen deutlich höhere Wert als für Sulingen und teilweise auch für Thülsfelde ermittelt. Eine mögliche Ursache liegt in den Methoden selbst: Mit der N_2/Ar-Messung wird die entlang einer Fließbahn tatsächlich ablaufende Denitrifikation gemessen. Diese wird neben dem verfügbaren Gehalt an Reduktionsmitteln auch durch die geochemischen Milieubedingungen bestimmt. Beim Batch- und auch beim Tracerversuch werden diese Milieubedingungen teilweise durch Schaffung eines O_2-freien Milieus und ständigen Nitratüberschuss, eingestellt. Der Ablauf der Denitrifikation im Labor- und Tracerversuch wird somit allein durch die Verfügbarkeit von Reduktionsmitteln bestimmt. Es wird die potentiell mögliche Nitratelimination, respektive Denitrifikation, gemessen. Die qualitativen Unterschiede zwischen potentiell möglicher und tatsächlicher Denitrifikation im Grundwasserleiter unterstreichen die Notwendigkeit, neben Labor- und Tracerversuchen, auch N_2/Ar-Messungen durchzuführen. Die tatsächlich im Aquifer ablaufende Denitrifikation kann - neben einer Isotopenanalyse des gelösten NO_3^-, zum Beispiel nach MARIOTTI et al. (1988) - lediglich mittels N_2/Ar-Messungen erfasst werden.
- **Eine Charakterisierung von Grundwasserleitern hinsichtlich des Nitratumsatzes konnte allein durch wenige Tracerversuche nicht erfolgen.** Die Batch- und Tracerversuche lieferten für die gleichen Punkte (Sedimentproben) vergleichbare Ergeb-

nisse, siehe Kapitel 5.2.3.3. Die Ergebnisse der in den drei Gebieten angewendeten Tracerversuche unterscheiden sich jedoch teilweise von den Ergebnissen der Laboruntersuchungen: Beispielsweise ist die Denitrifikation bei den Tracerversuchen für Wehnsen höher, als für Thülsfelde; Sulfidgehalte und Umsatzkennwerte liegen für beide Gebiete jedoch in vergleichbarer Größenordnung. Zu berücksichtigen ist dabei, dass in jedem der Gebiete nur eine geringe Anzahl an Tracerversuchen durchgeführt wurde, siehe Tabelle 6-1. Das heißt, dass aus den Ergebnissen von Tarcerversuchen an 2 bis 3 Messstellen keine Bewertung eines Grundwasserleiters hinsichtlich möglicher Denitrifikation erfolgen kann.

7 Empfehlungen für Untersuchungen zur Denitrifkation im Grundwasserleiter

Im Folgenden wird eine Vorgehensweise für Untersuchungen aufgezeigt, mit denen die Denitrifikation im tieferen Grundwasserleiter beschrieben und in numerischen Transportmodellen berücksichtigt werden kann. Die Empfehlungen wurden auf der Basis von Untersuchungen aufgestellt, die in den vorangegangenen Kapiteln beschrieben worden sind. Dabei erwies sich die Denitrifikation als der quantitativ wirksamste Prozess der Nitratelimination. Deshalb zielen die Empfehlungen ausschließlich auf die Identifizierung und Quantifizierung der Denitrifikation ab. Der folgende Ablaufplan stellt einen Vorschlag dar, der an das jeweilige Untersuchungsgebiet anzupassen ist. Zu beachten sind die folgenden Bedingungen:

- Die Grundwasserhydraulik kann ausreichend abgesichert beschrieben werden. Es existiert ein, beispielsweise mit Altersdatierungen, abgesichertes Strömungsmodell.
- Der Nitrateintrag in den Grundwasserleiter ist bekannt oder kann flächen- und ggf. zeitdifferenziert abgeschätzt werden.
- Der Nitrateintrag erfolgt flächendeckend ausschließlich über die Grundwasseroberfläche. Punkt- und Linienquellen werden hier nicht mit berücksichtigt.
- Prozesse in der wasserungesättigten Zone werden hier nicht mit berücksichtigt, sondern müssen gesondert betrachtet werden.

Das Ziel der Erkundungen ist es, orts- und zeitabhängige Kennwerte für die Denitrifikation, $\lambda(x,y,z,t)$, zu gewinnen. Mit den Untersuchungen zur Denitrifikation sollen folgende Fragen beantwortet werden:

I. In welchen Bereichen des Grundwasserleiters kann wirkungsvoll Denitrifikation stattfinden?

In Bereichen reduzierenden Milieus kann bei verfügbarem Nitrat, verfügbaren Reduktionsmitteln und aktiven Mikroorganismen Denitrifikation ablaufen. In Bereichen mit $\beta(O_2) > 5\ mg \cdot l^{-1}$, das heißt vornehmlich oxidierendem Milieu, läuft keine quantitativ wirkungsvolle Denitrifikation ab, siehe Abschnitt 5.1.3.2, Abbildung 5-4. Die Ausgrenzung von Arealen oxidierenden Milieus wird anhand von verfügbaren oder aufzunehmenden Daten der Wasserbeschaffenheit durchgeführt, siehe Abbildung 7-1. Es wird davon ausgegangen, dass im Grundwasserleiter der Sauerstoffgehalt mit zunehmender Tiefe abnimmt, siehe Anlage 3, Blatt 3-6 und 3-11.

Treten im Aquifer über die gesamte Mächtigkeit sehr hohe Nitratkonzentrationen auf, so kann zwar durchaus Denitrifikation stattfinden, für den Wasserversorger ist diese jedoch nicht wirkungsvoll genug, wenn im Entnahmebrunnen der Grenzwert von $\beta = 50\ mg \cdot l^{-1}$ überschritten wird. Weitere Untersuchungen über den Ablauf von Denitrifikation im Einzugsgebiet des betreffenden Brunnens machen dann meist wenig Sinn.

II. In welchen Bereichen des Grundwasserleiters findet Denitrifikation statt?

Daten der Wasserbeschaffenheit, wie beispielsweise $\beta(SO_4^{2-})$ oder $\beta(HCO_3^-)$ können Indizien für den Ablauf einer Denitrifikation sein, siehe Abschnitt 5.1.2. Ein Nachweis der Denitrifikation im Anstrombereich der Filterstrecke einer Messstelle kann über die Messung des N_2/Ar-Verhältnisses und der N_2O-Konzentration erfolgen, siehe Abbildung 7-1. Ein, gegenüber dem temperaturabhängigen Gleichgewicht von $N_2/Ar = 37{,}1$

bis 38,6 erhöhtes Konzentrationsverhältnis stellt einen direkten Nachweis der Denitrifikation im Anstrom des beprobten Messpunktes dar, siehe Kapitel 5.1.2. Eine exaktere Lokalisierung, beispielsweise wo genau auf der Fließbahn, ist mit dieser Methode nicht möglich. Liegen Altersdatierungen der beprobten Messstellen vor, kann mit Einschränkungen ein λ_o-Wert, siehe Kapitel 5.1.2.3, für die jeweilige Stromröhre geschätzt werden.

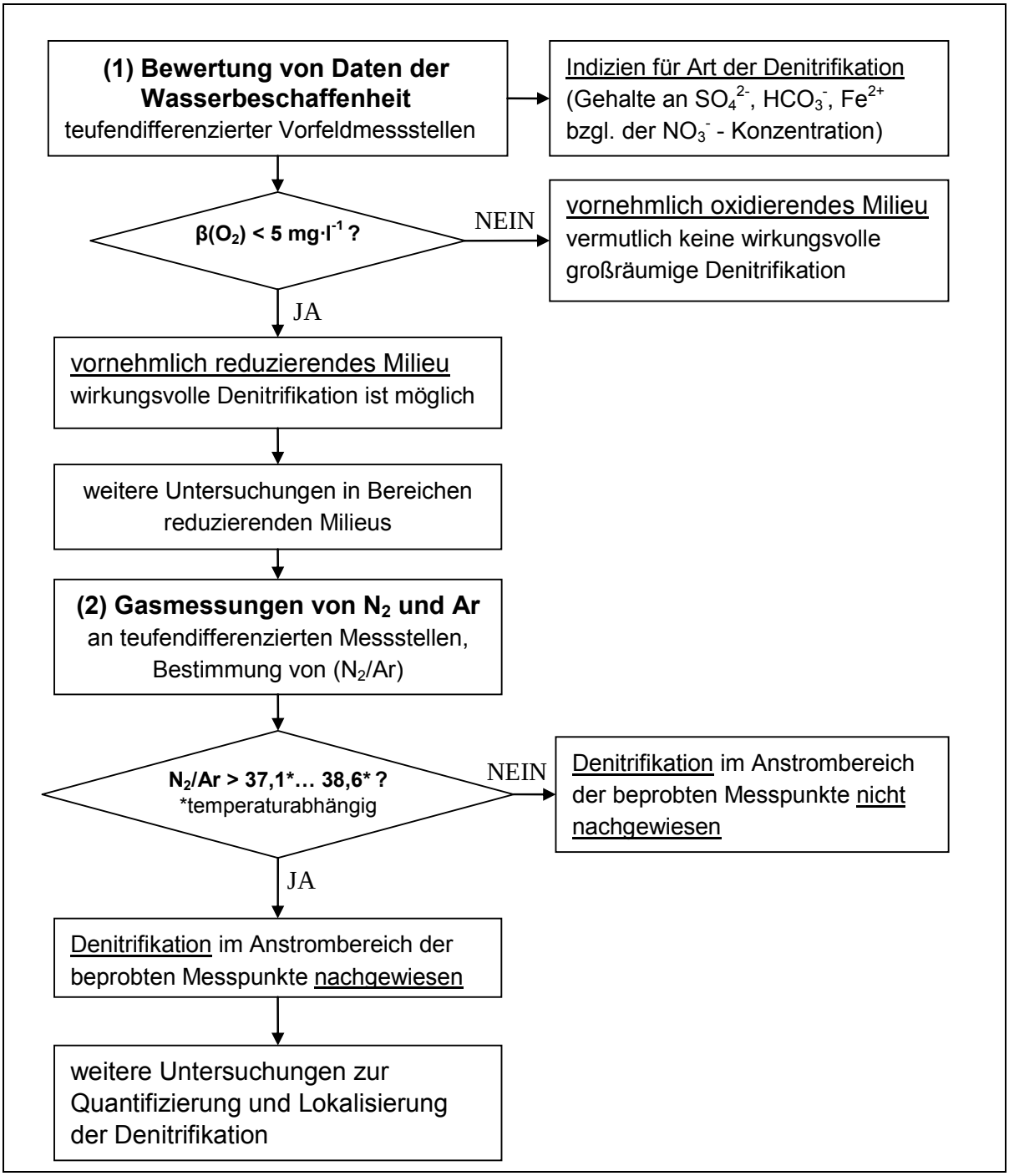


Abbildung 7-1: Ablauf von Vorerkundungen

Ein Ergebnis der Voruntersuchung ist demzufolge die Ausweisung von oxidierenden Bereichen, in denen keine Denitrifikation stattfinden kann. Wird im Rahmen der Voruntersuchung Denitrifikation mit der Gasmessung nachgewiesen, so sind weiter Detailuntersuchungen

durchzuführen, siehe Abbildung 7-2. Mit den Detailuntersuchungen sollen folgende Fragen beantwortet werden:

III. In welchem Umfang findet eine wirkungsvolle Denitrifikation statt?

Für den Ablauf einer Denitrifikation müssen Reduktionsmittel, wie Sulfidschwefel oder organischer Kohlenstoff verfügbar sein. In einem Grundwasserleiter mit unterschiedlichen Schichtungen passiert der Großteil des Wassers die hydraulisch aktiven Bereiche, die hier mit $K \geq 10^{-6} m \cdot s^{-1}$ angesehen werden. Für die Wassergüte ist demzufolge der Ablauf von Denitrifikation in hydraulisch aktiven Bereichen von Bedeutung.

Werden im Rahmen einer Detailuntersuchung, siehe Abbildung 7-2, mit Bohrungen Sedimentproben gewonnen, so können hydraulische Parameter (K-Wert) und die Gehalte an Reduktionsmitteln (Sulfidschwefel und TOC) bestimmt werden. Das Abteufen von Spülbohrungen zur Gewinnung von Sedimentproben ist ungeeignet, da der Feinkornanteil und Reduktionsmittelgehalt stark unterschätzt werden kann, siehe Abschnitt 4.1.4. Für viele Gebiete ist von einer engen Korrelation zwischen Glühverlust und TOC, sowie zwischen Gesamt- und Sulfidschwefel auszugehen, siehe Kapitel 4. Dieser Zusammenhang muss zuerst für jedes Untersuchungsgebiet bestätigt werden, um die Gehalte an Sulfid-S und TOC aus den Parametern Gesamt-S und Glühverlust über Regressionsgleichungen berechnen zu können. Sind Sulfid oder TOC in hydraulisch aktiven Bereichen vorhanden, so kann dort Denitrifikation potentiell stattfinden.

Die Kinetik der Denitrifikation muss an ungestörten Proben mit Säulen- oder Batchversuchen bestimmt werden, siehe Punkt (5) in Abbildung 7.2. Die Sedimentproben sind nach der Gewinnung kühl, das heißt bei etwa 10°C, zu lagern, um die vorhandene Mikroorganismenpopulation nicht zu verändern. Ein Kontakt der Sedimentprobe mit Sauerstoff ist unbedingt zu vermeiden, da vorhandene Reduktionsmittel sonst oxidiert werden. Beim Aufbau und der Durchführung von Laborversuchen ist auf ein sauerstofffreies Milieu zu achten, siehe Kapitel 4.2 und 4.3. Die Kinetik des Nitratumsatzes, respektive der Denitrifikation wird mit Kennwerte (λ) beschrieben. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Batchversuche erlaubten die Anpassung von Funktionen für eine Reaktion 0. oder 1. Ordnung an den zeitlichen Verlauf der Nitratelimination. Für die Funktionen wurden die Parameter λ_o und λ_1 berechnet. Diese λ-Werte stellen wichtige Eingangsparameter für ein numerisches Transportmodell mit Berücksichtigung der Nitratelimination dar. Können Reaktionen nach der Michaelis-Menten-Kinetik, 0. oder 1. Ordnung nicht angepasst werden, so ist die Anpassung weiterer kinetischer Modelle zu prüfen. Voraussetzung ist allerdings, dass die jeweils gewonnenen Parameter auch in das genutzte numerische Transportmodell eingebunden werden können.

Empfehlenswert ist die Messung der Konzentration der N-Gase. Damit kann geprüft werden, ob die Nitratelimination mit eine Gasproduktion ($N_{2(Deni)}$, N_2O) einhergeht. Ist dies nicht der Fall, so muss davon ausgegangen werden, dass das Nitrat nicht durch Denitrifikation eliminiert wird. Die hier geschilderten Empfehlungen sind dann nicht mehr ausreichend, um den Nitratumsatz zu beschreiben. Es sind zusätzliche Untersuchungen notwendig, beispielsweise zur Nitratsorption oder dissimilatorischen Nitratreduktion zu Ammonium (DNRA), siehe Abschnitt 4.2.2.2.

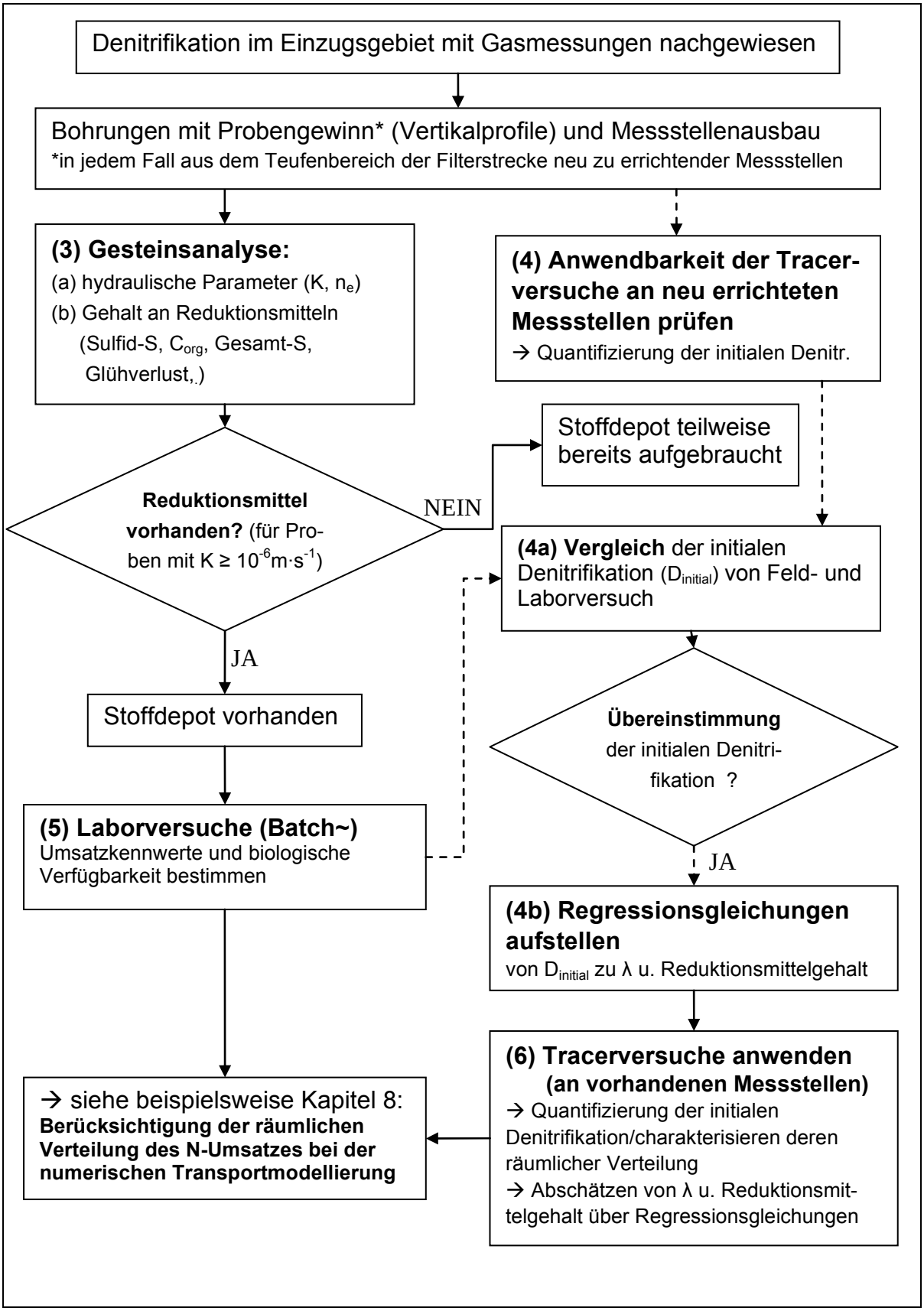


Abbildung 7-2: Ablauf von Detailerkundungen

Wie die vorliegenden Untersuchungen, Kapitel 4 und 5 zeigen, sind die Gehalte an Reduktionsmitteln im Untergrund stark heterogen verteilt. Um eine Aussage über die daraus resultierende Heterogenität der Denitrifikation zu treffen, muss der N-Umsatz

für möglichst viele Punkte eines Gebietes bestimmt werden. Der notwendige Umfang, beispielsweise die Anzahl von Bohrungen, kann auf Basis der vorliegenden Untersuchungen nicht fixiert werden.

Werden Bohrungen durchgeführt, so ist deren Ausbau zu Messstellen ist zu empfehlen. An den errichteten Messstellen sollten die in Kapitel 5 beschriebenen Tracerversuche durchgeführt werden. Bei den hier vorgestellten Gebieten konnten Umsatzkennwerte, die im Labor bestimmt wurden, mittels Feldversuchen in ihrer Größenordnung bestätigt werden, siehe Kapitel 5. Ob dies in dem jeweils vorliegenden Gebiet der Fall ist, ist jeweils zu prüfen, siehe Abbildung 7-2, Punkt (4). Wichtig dafür ist, dass an den Sedimentproben aus dem Teufenbereich der Filterstrecke die oben genannten und in Kapitel 4 beschriebenen Batchversuche durchgeführt werden. Liegen die Ergebnisse von Labor- und Feldversuchen in der gleichen Größenordnung, so ist der Einsatz der Tarcerversuche auch an bestehenden Vorfeldmessstellen zu empfehlen. Über Regressionsgleichungen kann aus der in situ – Denitrifikation eine Abschätzung der λ-Werte und des Gehaltes an Reduktionsmitteln getroffen werden, siehe Kapitel 5.2.3. Damit wird das Informationsnetz weiter verdichtet. In Abbildung 7-2 sind die Arbeitsschritte des Punktes (4) mit gebrochenen Linien verbunden: Aufgrund der geringen Vergleichs-Datenbasis von Labor- und Feldversuch, werden diese Untersuchungsschritte notwendig sein. Liegt ein umfangreicher Datenpool von vergleichbaren Feld- und Labormessungen vor und wurden darauf basierende, hinreichend genaue Regressionsgleichungen bestimmt, so könnte dann auf den Test der Anwendbarkeit der Tracerversuche verzichtet werden.

Die räumliche Verteilung von Punktwerten (beispielsweise λ-Werte) muss nun beschrieben werden, um die Punktinformationen in den Raum zu übertragen und anschließend in ein numerisches Transportmodell einzubinden. Eine mögliche Vorgehensweise dafür ist im folgenden Kapitel 8 beschrieben.

IV. Wie lange wird die Denitrifikation noch ablaufen können?

In der vorliegenden Arbeit wurden die ermittelten λ-Werte vereinfacht als konstant (zeit-unabhängig) angenommen. Die folgende kurze Ausführung ist als Ausblick zu verstehen: In der Realität sind die λ-Werte, sofern sie sich auf die Konzentration des Nitrats beziehen, abhängig vom Gehalt biologisch verfügbarer Reduktionsmittel. Der Anteil biologisch verfügbarer Reduktionsmittel kann mit Hilfe von Batchversuchen bestimmt werden. Dafür müssen die Versuche bis zum Stillstand durchgeführt werden, der durch den Aufbrauch an Reduktionsmitteln hervorgerufen wird. Der Anteil an biologisch verfügbaren Reduktionsmitteln, nimmt bei ständiger Nitratzufuhr stetig ab. Dieser Vorgang und somit die begrenzte Lebensdauer der Prozesse könnte mit einem Multi-Spezies-Modell berücksichtigt werden, siehe WRIEDT (2004).

8 Berücksichtigung der räumlichen Verteilung des N-Umsatzes[1] bei der numerischen Transportmodellierung – Vorgehensweise und Auswirkung

8.1 Ziele

Die Planung für Trinkwasserschutzgebiete macht häufig eine Abschätzung der zeitlichen Entwicklung der Nitratkonzentration im Grund- und Rohwasser notwendig. Eine Möglichkeit die Wassergüte zu prognostizieren, kann die Anwendung von numerischen Transportmodellen sein. Neben einem Strömungsmodell, der Kenntnis des Nitrateintrages und der Transportparameter, wie beispielsweise Dispersion, sind weiterhin Informationen zur räumlichen Verteilung des Nitrat-Abbaus im Grundwasserleiter notwendig. In den vorangegangenen Kapiteln 4, 5 und 7 wurden Möglichkeiten zur Gewinnung von Informationen zum Nitratumsatz im Grundwasserleiter aufgezeigt. Als Ergebnis von Untersuchungen im Feld- oder Labor liegen für die hydraulischen und transport-relevanten Parameter Punktinformationen vor. Diese Parameter lassen durch ihre unterschiedliche Größenordnung auf eine räumlich heterogene Verteilung im Untergrund schließen. Für die Anwendung numerischer Modelle müssen deshalb die Punktinformationen auf den dreidimensionalen Raum des Untergrundes übertragen werden. Dabei ist die heterogene Verteilung der Punktinformationen zu berücksichtigen. Diese Übertragung wird als Regionalisierung bezeichnet. Das Ergebnis der Regionalisierung ist eine Schätzung der orts- und gegebenenfalls auch zeitabhängigen Variablen für jeden Punkt, respektive jede Zelle, eines 3-D-Modells des Untergrundes. Diese wird im Folgenden trotz des deterministischen Anteils auch als Zufallsvariable Z(x,y,z,t) bezeichnet.

In diesem Kapitel soll erstens ein Weg aufgezeigt werden, gewonnene Punktinformationen zum N-Umsatz zu regionalisieren und in ein Transportmodell einzubinden. Zweitens soll die Auswirkung unterschiedlicher Größenordnungen ausgewählter Parameter und deren räumlicher Verteilungen auf die berechneten Konzentrationsverläufe erfasst werden. Die Arbeitshypothese ist, dass unterschiedliche räumliche Verteilungen von Kennwerten starken Einfluss auf das berechnete Ergebnis, das heißt die berechnete Nitratkonzentration ausüben. Wird diese Hypothese bestätigt, so ist ein entsprechender Untersuchungsaufwand zur Beschreibung der räumlichen Verteilung von λ-Werten, siehe Kapitel 7, notwendig. Eine Übersicht über die durchzuführenden Arbeitsschritte gibt der folgende Abschnitt 8.2.1.

8.2 Methoden und Vorgehensweise

8.2.1 Überblick

Vorgehensweise, die räumliche Verteilung von Parametern in einem numerischen Modell zu berücksichtigen

Im vorliegenden Kapitel soll ein Weg aufgezeigt werden, wie Punktinformationen zum Nitratumsatz in ein numerisches Transportmodell eingebunden werden können. An dieser Stelle wird der Übersichtlichkeit halber ein zweidimensionales Strömungs- und **Transportmodell** aufgebaut. Die Arbeitsschritte für den Aufbau eines numerischen Transportmodells sind in

[1] Im folgenden Kapitel wird der Parameter λ_1 regionalisiert, der für die Nitratelimination, E(t), bestimmt worden ist. E(t) umfasst alle, im Batchversuch ablaufenden Nitrat-eliminiereden Prozesse. Aus diesem Grunde wird an dieser Stelle allgemein von „N-Umsatz“ gesprochen.

Abbildung 8-1 aufgezeigt. Die Größenordnung der Parameter und die Randbedingungen des Modells sind an die Gegebenheiten im Gebiet Wehnsen angelehnt. Zur **Regionalisierung** von Umsatzkennwerten (λ) wird ein stochastisches Simulationsverfahren angewendet, in das die vorliegenden Punktinformationen aus dem Gebiet Wehnsen einbezogen werden. Das Ergebnis der Regionalisierung sind unterschiedliche, gleichwahrscheinliche räumliche Verteilungen von Parametern, siehe auch Abbildung 8-3 in Abschnitt 8.2.3.1.

Durch den Aufbrauch biochemisch verfügbarer Reduktionsmittel ist ein zeitlich variierender Nitratabbau möglich. Der Verbrauch von Reduktionsmitteln wird an dieser Stelle nicht berücksichtigt. Die Umsatzkennwerte werden über den gesamten zu berechnenden Zeitraum als konstant angesetzt.

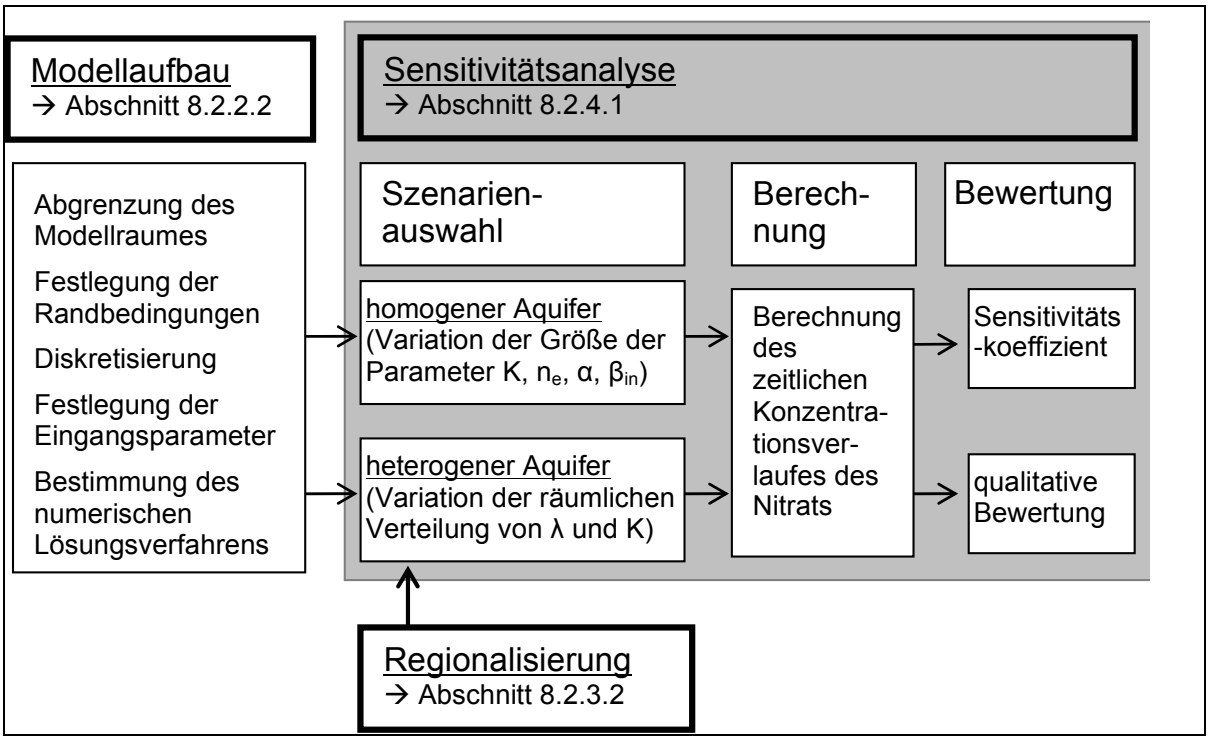


Abbildung 8-1: Übersicht der thematischen Schwerpunkte des Kapitels 8

Untersuchung der Auswirkung einer räumlich heterogenen Verteilung des N-Umsatzes

Mit dem aufgebauten numerischen Transportmodell wird der zeitliche Verlauf der Nitratkonzentration berechnet. Ziel dabei ist es, die Wirkung unterschiedlicher Größen ausgewählter Parameter und unterschiedlicher räumlicher Verteilungen auf den Nitrattransport in Form einer **Sensitivitätsanalyse** zu zeigen und zu bewerten, siehe Abbildung 8-1. Für die Sensitivitätsanalyse werden unterschiedliche Szenarien ausgewählt, siehe Abschnitt 8.2.4.2 und 8.2.4.3. Dabei wird einerseits ein homogen aufgebauter Aquifer betrachtet, bei dem die Größe ausgewählter Eingangsparameter variiert wird, siehe Abbildung 8-1. Zum anderen wird ein heterogen aufgebauter Aquifer betrachtet, womit der Einfluss der räumlichen Verteilungen von Umsatzkennwerten (λ) oder K-Werten untersucht werden kann. Mögliche räumliche Verteilungen der Parameter K-Wert und λ-Wert werden durch Regionalisierung der gemessenen Punktdaten erzeugt, siehe Abschnitt 8.2.3.2.

Im Abschnitt 8.2.2.1 wird ein kurzer Überblick zum Kenntnisstand der Transport-Modellierung und im Abschnitt 8.2.3.1 über Verfahren der Regionalisierung aufgezeigt.

8.2.2 Modellierung des Nitrattransports im Aquifer

8.2.2.1 Stand des Wissens

Zunächst wird der Begriff „Modellierung“ eingrenzt: Die folgenden, kurzen Ausführungen beschränken sich auf die Beschreibung des Stofftransportes im Grundwasserleiter mittels numerischer Strömungs- und Transportmodelle. Das heißt, beispielsweise rein analytische oder rein thermodynamische Reaktionsmodelle, die nicht an numerische Strömungsmodelle gekoppelt sind, werden hier nicht betrachtet. Grundlagen der numerischen Strömungsmodellierung werden ebenfalls nicht ausgeführt, dazu sei beispielsweise auf folgende Literatur verwiesen: SPITZ & MORENO (1996), KINZELBACH & RAUSCH (1995), BUSCH et al. (1993), BEAR (1972).

Die Gleichung für den Transport von Stoffen im Untergrund setzt sich aus den Teilen hydrodynamische Dispersion (Dispersion/Diffusion), Advektion, einem Quell- /Senkenterm sowie einem Reaktionsterm, welcher interne Reaktionen wie Sorption, Abbau und Zerfall repräsentiert, zusammen. Der Transport im Grundwasserleiter kann für den zwei-dimensionalen Fall, der im Folgenden betrachtet wird, wie folgt mathematisch beschrieben werden:

$$\frac{d\beta}{dt} = \frac{\partial}{\partial x}\left(v_a \cdot \beta\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(D_L \frac{\partial \beta}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(D_T \frac{\partial \beta}{\partial z}\right) \pm q_S \beta_S - \sum_i R_i \qquad (8-1)$$

Konzentration (Zeit) = Konvektion -Dispersion ± Quellen/Senken - Reaktionen

β … Konzentration
t … Zeit
x, z … Ortskoordinaten
v_a … Abstandsgeschwindigkeit
D_L … Longitudinaler hydrodynamischer Dispersionskoeffizient, im Folgenden auch D_x
D_T … Transversaler hydrodynamischer Dispersionskoeffizient, im Folgenden auch D_z
q_s … Durchfluss pro Volumen ($Q \cdot V^{-1}$) für Quellen (+) und Senken (-)
β_s … Konzentration für Quellen und Senken
R … Reaktionsterm

Die Stofftransportgleichung besteht aus Differentialgleichungen erster Ordnung (Advektionsterm) und zweiter Ordnung (Dispersionsterm). Dadurch wird die numerische Lösung erschwert. Gleichzeitig kann dass Ergebnis, bedingt durch den Übergang von der differentiellen Betrachtung zum Differenzenquotient ($\partial\beta \rightarrow \Delta\beta$), durch numerische Dispersion (künstliches Vermischen aufgrund der räumlichen Diskretisierung), Oszillation, Rundungsfehler, Fehler in der Massenbilanz u.a. beeinflusst werden, so dass die numerisch ermittelten Konzentrationen von der analytisch korrekten Lösung der Gleichung abweichen können. Auf diese Probleme wird unter Abschnitt 8.2.2.2 eingegangen.

Es stehen verschiedene numerische Lösungsverfahren zur Verfügung, die sich hinsichtlich Genauigkeit der Lösung, Bilanztreue, Rechenzeit sowie numerischer Stabilität deutlich unterscheiden. Die gebräuchlichsten Typen sind:

- Finite-Differenzen-Verfahren
- Finite-Elemente-Verfahren
- Charakteristikenverfahren (Advektiver Transport mittels Partikeltracking, dispersiver Transport und Reaktionen mit Finite-Differenzen-Verfahren) sowie

- Random-Walk-Methoden (reines Partikeltracking-Verfahren, welches auf Ansätzen der statistischen Physik basiert).

Grundsätzlich zeigen die Finite-Differenzen /-Elemente- Verfahren größere Einflüsse durch numerische Dispersion, geben aber im Gegensatz zu den Charakteristikenverfahren und Random-Walk-Methoden die Massenbilanz der transportierten Stoffe genau wieder. Weiterführende Erläuterungen können der Literatur entnommen werden, beispielsweise KINZELBACH (1992), SPITZ & MORENO (1996), SCHÄFER (2004). Es sei an dieser Stelle vorweggenommen, dass als Lösungsverfahren in dieser Arbeit die Finite-Differenzen-Methode gewählt worden ist, die mit der Software MT3D, ZHENG (1990), umgesetzt wurde.

In einem Modell zur Berechnung des Nitrattransportes können in Anlehnung an Gleichung (8 – 1) beispielsweise folgende Größen beziehungsweise Prozesse berücksichtigt werden:

- flächen- und zeitdifferenzierter Nitrateintrag β_{in} ins Grundwasser
- räumlich variable Dispersion (α_x und α_z)
- räumlich variabler Nitratabbau $\lambda(x,y,z)$ (Denitrifikation)
- räumlich und zeitlich variabler Nitratabbau $\lambda(x,y,z,t)$, abhängig vom Reduktionsmitteldepot, sowie die Berechnung der Konzentration von Reaktionsprodukten der Dentrifikation

Es ist eine Unterscheidung in reaktive und nicht-reaktive Modelle des Nitrattransportes möglich. Als nicht-reaktiv wird an dieser Stelle definiert, dass keinerlei Elimination vorhanden ist. Da in den vorangegangen Kapiteln die Denitrifikation im Grundwasserleiter als quantitativ bedeutsamer Eliminationsprozess von Nitrat identifiziert worden ist, muss dieser in Transportmodellen der hier beschriebenen Gebiete berücksichtigt werden. Aus diesem Grunde werden nicht-reaktive Modellansätze nicht weiter betrachtet.

Bei den reaktiven Transportmodellen ist eine Unterscheidung in Einzelspezies-Modelle und Multispezies Modelle möglich. Die Einzelspezies-Modelle erlauben die Berücksichtigung eines einfachen Abbaus. Weitere, die Denitrifikation im Aquifer beeinflussende Faktoren, wie der Sauerstoffgehalt und die mikrobielle Verfügbarkeit von Reduktionsmitteln können mit diesen Modellansätzen nicht mit erfasst werden. Der Abbau wird meist über einfache Ansätze, wie Reaktionen 0. oder 1. Ordnung beschrieben. Einzelspezies-Modelle werden beispielsweise mit der Software FEFLOW, DIERSCH (1992), ASM, CHIANG et al. (1998) oder MT3D, ZHENG (1990) umgesetzt.

Mit Multi-Spezies Modellen werden die direkt und indirekt am Umsatz beteiligten Stoffe berücksichtigt. Dabei kann eine Reaktionskinetik berücksichtigt werden oder die Einstellung eines thermodynamischen Gleichgewichtes nach jedem Zeitschritt enthalten sein, SCHÄFER (1999). Der Einsatz eines thermodynamischen Gleichgewichtsmodells zur Berechnung des reaktiven N-Transportes setzt voraus, dass (a) die Reaktion im Vergleich zur Transportgeschwindigkeit schnell verläuft, (b) die mikrobiellen Prozesse durch enzymatisch katalysierte Redoxreaktionen beschreibbar sind und (c) kein Nettowachstum der Mikroorganismenpopulation erfolgt, RÖßNER (1996). Weit verbreitete Programme umfassen die PHREEQ-Familie, PARKHURST et al. (1980). Diese Modelle haben den Vorteil, dass neben Nitrat noch weitere, die Wasserbeschaffenheit beeinflussende Stoffkonzentrationen im Zusammenhang mit der Denitrifikation berechnet werden. Teilweise ist auch eine Berücksichtigung des Gehaltes an Reduktionsmitteln und demzufolge auch deren räumlicher Verteilung möglich. Kinetische Multi-Spezies Modelle werden beispielsweise mit der Software MT3DMS, ZHENG & WANG

(1998), RT3D, CLEMENT (1997), MIN3P, MAYER (1999), CoTAM, HAMER & SIEGER (1994) oder TBC, SCHÄFER et al. (1998) umgesetzt.

Einige Beispiele aus der Literatur für die Modellierung des Nitrattransportes im Grundwasserleiter sind in Tabelle 8-1 gegeben. Die angegebenen Beispiele belegen, dass eine, in Raum und Zeit variierende Denitrifikation bisher wenig berücksichtigt wurde. Viel versprechend ist der Ansatz von WRIEDT (2004), bei dem der Aufbrauch an Reduktionsmitteln mit laufender Denitrifikation einbezogen wird. Für die praktische, routinierte Anwendung ist jedoch die dort vorgestellte Entwicklung eines speziellen, benutzerdefinierten Reaktionsmoduls für RT3D zu komplex. Der in PÄTSCH (2006) praktizierte Ansatz einer fortschreitenden Nitrat- und Reaktionsfront ist wesentlich einfacher, geht jedoch von einer Reihe Annahmen, insbesondere der gleichmäßigen Ausbreitung der Reaktionsfront aus, die in natura so meist nicht gegeben sein dürften. CARLE et al. (2006) berücksichtigt zwar die Heterogenität des Aquifers bei der Berechnung des Nitrattransportes, geht jedoch aufgrund der vorliegenden geochemischen Daten davon aus, dass im Modellgebiet keine Denitrifikation stattfindet.

Tabelle 8-1: Beispiele von Modellierung des Nitrattransportes im Grundwasser

Autor	Modelltyp/ Software	β_{in}	α_L	Denitrifikation
SCHÄFER (1992)	FDM, TraBi	c	c	$\lambda(t)$
HOUBEN (2000)	1D, PHREEQC	c	--	$\lambda(t)$
GRAF & SCHÄFER (2002)	FDM; PMWin 5.0 MT3DMS	v_A	c	--
WICHMANN et al. (2003)[2)]	FDM PMWin, TBC	v_A		λ
WRIEDT (2004)	FDM; MODFLOW, RT3D	v_A[1)]	c, v	$\lambda(t,x,z)$
CARLE et al. (2006)	ParFlow	v	v	--
PÄTSCH (2006)	FDM; MODFLOW,MT3D	v_A	c, v	$\lambda(t,x,y,z)$

v_A …Variation in der Fläche (2D), c…Konstante, -- … Parameter bzw. Prozess bleibt unberücksichtigt, [1)]Kopplung mit ungesättigter Zone, [2)]Modellierung des reaktiven Nitrattransportes unter Berücksichtigung der chemolithotrophen Denitrifikation, β_{in} .... Nitrateintrag

8.2.2.2 Vorgehensweise

Modellaufbau

Für einen Abschnitt des Aquifers in Wehnsen wird ein numerisches 2D-Modell mit der Software VisualModflow 2.8.2, MCDONALD & HARBAUGH (1988) und MT3D, ZHENG & WANG (1998) aufgebaut. Die entsprechenden Eingabeparameter, siehe Tabelle 8-2, orientieren sich am untersuchten Grundwasserleiter. Eine Nachbildung der Situation im Gebiet Wehnsen wird nicht angestrebt. Die berechneten Ergebnisse sollen deshalb auch nicht die zeitliche Entwicklung der Konzentration des Nitrates im Grundwasserleiter Wehnsen nachbilden. Für den Aufbau und die Anpassung von 2D-Modellen an die Situation in Wehnsen sind Details in WALTHER et al. (2005) beschrieben. Wie in Abschnitt 8.1 und 8.2.1 erwähnt, soll das Transportmodell dazu dienen, die Wirkung der Variation der Eingangsparameter auf die berechnete Nitratkonzentration in Form einer Sensitivitätsanalyse zu untersuchen.

Die Abbildung 8-2 zeigt den, für die Modellbildung ausgewählten Abschnitt des unteren Grundwasserleiters im Gebiet Wehnsen gemäß der Abbildung A1-9 in Anlage 1, Blatt 1-9. Da im oberen Grundwasserleiter aufgrund hoher Sauerstoffkonzentrationen ($\beta(O_2)$ >5 $mg \cdot l^{-1}$), siehe Kapitel 5, eine quantitativ wirksame Denitrifikation teilweise nicht möglich ist, wird der obere Bereich nicht weiter berücksichtigt. Bereiche mit einer sehr geringen hydraulischen Leitfähigkeit ($K < 10^{-6}$ $m \cdot s^{-1}$), siehe Kapitel 3, werden nur von einer geringen Wassermenge durchströmt, so dass eine mögliche Denitrifikation nur einen quantitativ geringen Einfluss auf die Wassergüte hat. Grundwasserstauer bleiben deshalb im Folgenden ebenfalls unberücksichtigt. Der gewählte Abschnitt hat eine Ausdehnung von x = 1000 m und z = 20 m.

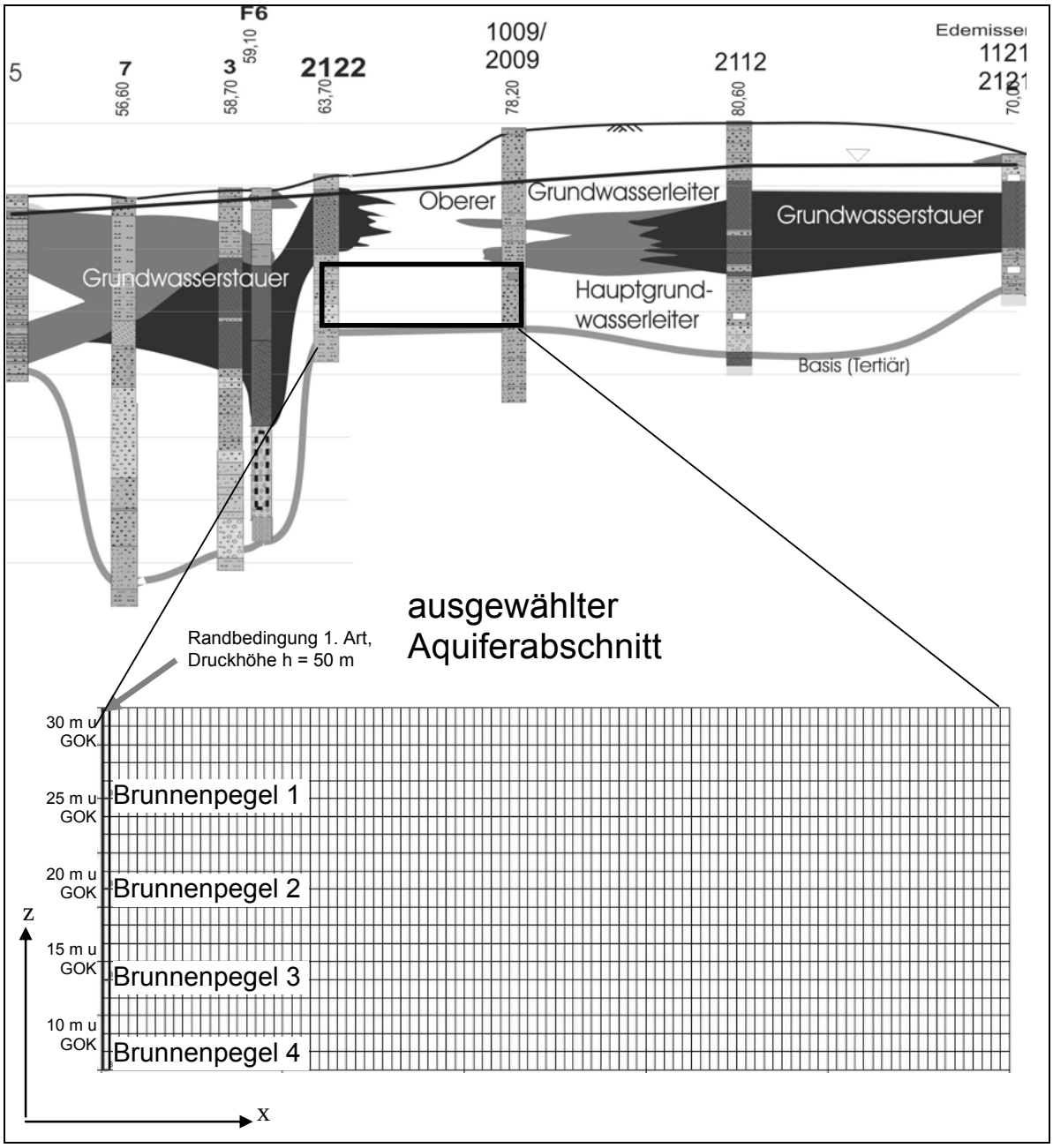


Abbildung 8-2: Schnittdarstellung eines Aquiferabschnittes im Gebiet Wehnsen mit Diskretisierung im ausgewählten Modell-Bereich

Am linken Modellrand wird eine konstante Druckhöhe (Randbedingung 1. Art) mit 50 m angesetzt, siehe Abbildung 8-2. Am rechten Modellrand wird eine Wasserscheide durch eine Randbedingung 2. Art (kein Zustrom) realisiert. Für die Unterkante des vertikal-ebenen

Schnittes wird ebenfalls eine undurchlässige Berandung angenommen. An der Modelloberkante wird eine Randbedingung 2. Art (Zustrom durch Grundwasserneubildung) angesetzt. Der Stoffzufluss erfolgt ausschließlich von oben. Dabei wird für das neu gebildete Grundwasser eine Stoffkonzentration (β_{in}) angesetzt. Das Grundwasser strömt demzufolge von rechts nach links. Das Druckgefälle bildet sich entsprechend der Grundwasserneubildung und der hydraulischen Leitfähigkeit aus. Die Konzentration wird an 4 ausgewählten Punkten des linken Modellrandes berechnet, die ebenfalls in dieser Abbildung dargestellt sind. Der Betrachtungszeitraum wurde mit 50 Jahren angesetzt. Diese Zeitspanne schließt sowohl den Gültigkeitszeitraum einer wasserrechtlichen Bewilligung von 30 Jahren, als auch die durchschnittliche Abschreibungsdauer von Vertikalfilterbrunnen ein.

Tabelle 8-2: Eingangsparameter für das Strömungs- und Transportmodell

Parameter	Basiswert	Spannweite	
$\Delta x^{1)}$	10	--	m
$\Delta z^{1)}$	1	--	m
K_x	$6 \cdot 10^{-4}$	10^{-2} - 10^{-6}	$m \cdot s^{-1}$
$K_z^{2)}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-3}$ - $3 \cdot 10^{-7}$	$m \cdot s^{-1}$
n_e	0,2	0,10 - 0,25	--
$n_{ges}^{3)}$	0,22	0,11 - 0,28	--
α_x	10	5 - 100	m
$\alpha_z^{4)}$	1	0,5 - 10	m
β_{in}	200	100 - 200	$mg \cdot l^{-1}$ NO_3^-
GWN	250	--	$mm \cdot a^{-1}$

1) Ausdehnung der Zellen, hier angenommene Beziehungen:
2) $K_z = 1/3 \cdot K_x$, 3) $n_{ges} = 1{,}1 \cdot n_e$, 4) $\alpha_z = 1/10 \cdot \alpha_x$

Wie bereits erwähnt, wurde die Methode der Finiten-Differenzen zur Lösung der Transportgleichung verwendet, die mit der Software Modflow+MT3D umgesetzt wird. Die numerischen Stabilitätskriterien, Peclet-, Courant- und Neumann-Kriterium, sowie das Verhältnis der Längen der Zellseiten wurden geprüft. Die Anlage 5, Blatt 5-7 und 5-8 enthält die Ergebnisse. Detaillierte Ausführungen zu numerischen Lösungsverfahren sind in ZHENG & WANG (1999) enthalten. Für die vorliegenden Berechnungen wurde das TVD – Verfahren (Total Variation Dimishing) gewählt. Das TVD-Verfahren ist ein Finites-Differenzen-Verfahren höherer Ordnung, wie es für großskalige Gebiete mit geringen Konzentrationsgradienten empfohlen wird, SCHÄFER (2004).

Im folgenden Abschnitt wird die Regionalisierung von λ-Werten und K-Werten für den ausgewählten und im Modell abgebildeten Aquiferabschnitt dargestellt. Für die durchzuführende Sensitivitätsanalyse werden im Abschnitt 8.2.4 die Vorgehensweise und die gewählten Szenarien vorgestellt. Das Kapitel 8.3 enthält die Ergebnisse.

8.2.3 Regionalisierung

8.2.3.1 Stand des Wissens

Geostatistische Verfahren zur Regionalisierung

Seit einigen Jahrzehnten haben geostatistische Methoden in der hydrogeologischen Praxis Einzug gehalten. Geostatistische Methoden der Regionalisierung von Kenngrößen, beispielsweise für den Aufbau von Karten, umfassen die Familie der Kriging-Schätzungen. Diesen Schätzverfahren geht zunächst eine mathematische Beschreibung der räumlichen Variabilität dieser Kenngrößen, beispielsweise mit Variogrammen, voraus. Kennwerte von Aquiferen, wie beispielsweise die Transmissivität, können bei ausreichend dichten Messdaten in Abhängigkeit der Heterogenität geologischer Eigenschaften, häufig mit Kriging-Verfahren regionalisiert werden, siehe dazu beispielsweise SCHAFMEISTER (1999), AZOUZI & SCHRÖTER (2003). Eine ausreichende Datenmenge, die Voraussetzung für die Anwendung geostatistischer Verfahren ist, kann häufig nur für die Bodenzone oder den oberflächennahen Grundwasserbereich bereitgestellt werden, WACHTER et al. (2004), SCHAFMEISTER (1999).

Der Versuch einer Regionalisierung von Kennwerten zur Beschreibung der Denitrifikation im Grundwassergewinnungsgebiet Thülsfelde Fassung A, mit dem Kriging-Verfahren, basierend auf Daten aus Kern- und Rammkernbohrungen, ist in PÄTSCH (2006) dokumentiert. Die Ergebnisse belegen jedoch, dass Kenngrößen wie λ-Werte oder der Gehalt an Reduktionsmitteln aufgrund der geringen räumlichen Informationsdichte gemessen an der starken Heterogenität der Parameter mittels Kriging nicht interpoliert werden können. Aus diesem Grunde wird von einer Anwendung geostatistischer Regionalisierungsverfahren wie dem Kriging in dieser Arbeit abgesehen, da anhand von 3 Messpunkten (Bohrungen) auf einer Fläche von etwa 10 km² die räumliche Datendichte gemessen an der Heterogenität der Gesteinseigenschaften ebenfalls zu gering ist.

Stochastische Simulationsverfahren

Für Parameter, die engräumig sehr heterogen verteilt sind, sollte dem glättenden Schätzverfahren (Kringing), eine Methode vorgezogen werden, die diese Heterogenität realistisch nachvollziehen kann, SCHAFMEISTER (1999). Eine Möglichkeit bieten dafür so genannte stochastische Simulationen, die alternative, gleichwahrscheinliche, räumliche Verteilungen einer zeit- und ortsabhängigen Zufallsvariable erzeugen. Eine *erzeugte räumliche Verteilung eines Parameters* wird im Folgenden als **Realisation** bezeichnet. In dieser Arbeit werden Realisationen von λ- oder K-Werten für den modellierten Aquiferabschnitt erzeugt.

Dieses Vorgehen findet in der Hydrogeologie bereits Anwendung. Beispielsweise werden mit einer stochastischen Simulation Transmissivitätsfelder erzeugt, GÓMEZ-HERNÁNEZ et al. (1997), CAPILLA et al. (1997) oder die räumliche Variabilität von hydraulischer Leitfähigkeit und Grundwasserneubildung beschrieben, GÓMEZ-HERNÁNEZ et al. (1989). Eine Übersicht über die Anwendung stochastischer Methoden in der Hydrogeologie geben MARSILY et al. (2005).

Unter folgenden Bedingungen stellt das Ergebnis einer stochastischen Simulation eine mögliche Realisation von Zufallsvariablen dar, SCHAFMEISTER (1999):

- die Wahrscheinlichkeitsdichte der Variablen, geschätzt durch ein Histogramm, wird reproduziert,

- die räumliche Varianz, geschätzt durch das Variogramm, wird reproduziert und
- die am Punkt x_i gemessenen Werte bleiben erhalten (Konditionierung)

Im Allgemeinen werden bei einer stochastischen Simulation Zufallszahlen erzeugt, die innerhalb eines Interfalls gleichverteilt sind. Zusätzlich muss die räumliche Korrelations-Struktur abgebildet werden. Mit der „Monte-Carlo-Simulation“ können beliebig viele Zufallsverteilungen erzeugt werden, die die gleiche Verteilungsfunktion besitzen. Stochastische Simulationen ergeben nicht den besten Schätzwert an jedem Ort, wie beispielsweise das Kriging, sondern eine mögliche Verteilung. Aus der Vielzahl möglicher Verfahren, dargestellt beispielsweise in DEUTSCH & JOURNEL (1992), soll an dieser Stelle nur auf die *Sequentielle Indikatorsimulation* eingegangen werden. Dieses Verfahren hat aufgrund seiner Flexibilität bei der Behandlung ortsabhängiger Variablen, die nur unzureichend mit einer Normalverteilung beschrieben werden können, besondere Bedeutung erlangt, SCHAFMEISTER (1999). Das Prinzip ist in Abbildung 8-3 dargestellt und wird im Folgenden detailliert beschrieben. Es besteht darin, dass die verfügbaren Werte der zu regionalisierenden Variablen, definierten Klassen zu geordnet werden. Die räumliche Verteilung der verfügbaren Daten wird mit Hilfe geostatistischer Kenngrößen, siehe Abbildung 8-4, beschrieben. In Abhängigkeit der Häufigkeit der einzelnen Klassen und der geostatistischen Kenngrößen werden Zufallszahlen für einen definierten Raum gezogen.

Die ***Sequentielle Indikatorsimulation*** – Begriffserläuterung

Sequentiell bedeutet, dass Werte eines Parameters am Ort x unter Berücksichtigung der vorhandenen Werte in der Nachbarschaft von x erzeugt werden. „Vorhandene Werte“ sind dabei die realen Messwerte oder die bereits generierten Werte. Für die Punkte, für die Messwerte vorliegen, werden diese Messwerte beibehalten. Damit ist die Bedingung der Konditionierung erfüllt.

Der Begriff *Indikatorsimulation* beruht auf der Erzeugung von Indikatorwerten (i). Ein Indikatorwert, beziehungsweise eine Indikatorvariable ist ein „Anzeiger“, ob an einem Ort x ein bestimmter Zustand angetroffen wird oder nicht. Ein solcher Zustand kann beispielsweise die hydraulische Leitfähigkeit einer geologischen Schicht sein. Die Indikatorvariable kann dann beispielsweise anzeigen, ob am Punkt x eine grundwasserleitende oder –stauende Schicht angetroffen wird. Für ein Untersuchungsgebiet können Werte eines Parameters, wie beispielsweise der hydraulischen Leitfähigkeit K, in eigens definierte Datenklassen, begrenzt durch Intervallgrenzen, eingeteilt werden. Eine Indikatorvariable kann dann anzeigen, ob eine bestimmte Datenklasse angetroffen (vorliegt) wird oder nicht:

$$i(x;k)=\left\{\frac{1,\ \text{wenn am Ort x die Klasse k angetroffen wird}}{0,\ \text{wenn am Ort x die Klasse k nicht angetroffen wird}}\right\} \qquad (8-2)$$

Wird im ersteren Fall am Ort x, die Klasse k angetroffen, so nimmt die Indikatorvariable i den Werte „1“ an, andernfalls den Wert „0“.

Die Bezeichnung „Simulation“ bezieht sich auf die Erzeugung eines Zufallswertes für den Punkt x. Der Begriff Simulation ist deshalb nicht zu verwechseln mit Berechnungen auf der Basis eines numerischen Modells.

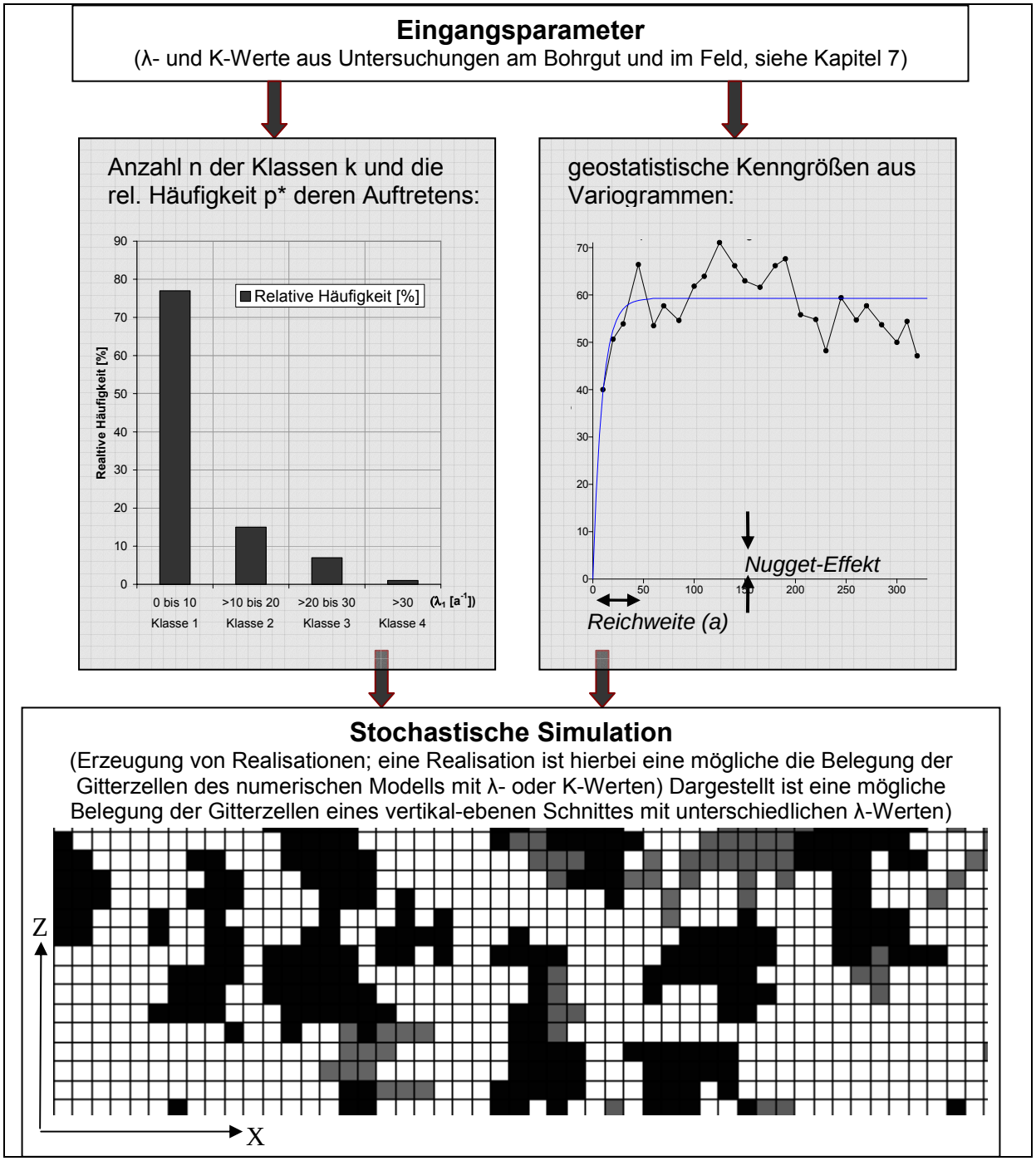


Abbildung 8-3: Darstellung eines Ablaufschemas der sequentiellen Indikator-Simulation

Die *Sequentielle Indikatorsimulation* – Ablaufschema

Das im Folgenden dargestellte Ablaufschema ist an die Ausführungen in SCHAFMEISTER (1999) und DEUTSCH & SCHNETZLER (2006) angelehnt.

(1) Definieren von Klassen k, durch das Festlegen von Schranken.

(2) Zuordnung der vorhandenen Daten zu jeweils einer der Klassen k. Die Klassen werden mit einer relativen Häufigkeit versehen, siehe Abbildung 8-3. Die relative Häufigkeit p*(k) des Auftretens der jeweiligen Klasse k wird wie folgt berechnet:

$$p^*(k) = \frac{n(k)}{n'} \qquad (8-3)$$

Dabei ist n(k) die Anzahl der Werte

innerhalb der Klasse k und n' die Gesamtanzahl der Werte.

(3) Belegung der Klassen mit Indikatorwerten nach Gleichung (8 – 2)

(4) Berechnung von Indikator-Semivariogrammen für jede Indikatorvariable, respektive jede Klasse k, mit der Gleichung:

$$\gamma_i(h) = \frac{1}{2} EX\{[i(x;k) - i(x+h;k)]^2\} \qquad (8 - 4)$$

Bei dieser Gleichung ist γ_i das Semi-Variogramm der Indikatorvariablen i in Abhängigkeit der Schrittweite h, siehe Abbildung 8-4. EX{} ist die Erwartungswertfunktion der Indikatorvariablen i, x ist die Ortsvariable und k ist die jeweilige Klasse.

Die **geostatistischen Kenngrößen** Reichweite (a) in horizontaler ($a_{horizontal}$) und vertikaler ($a_{vertikal}$) Richtung, sowie der Nugget-Effekt, können aus einem Variogramm abgelesen werden, siehe Abbildung 8-4.

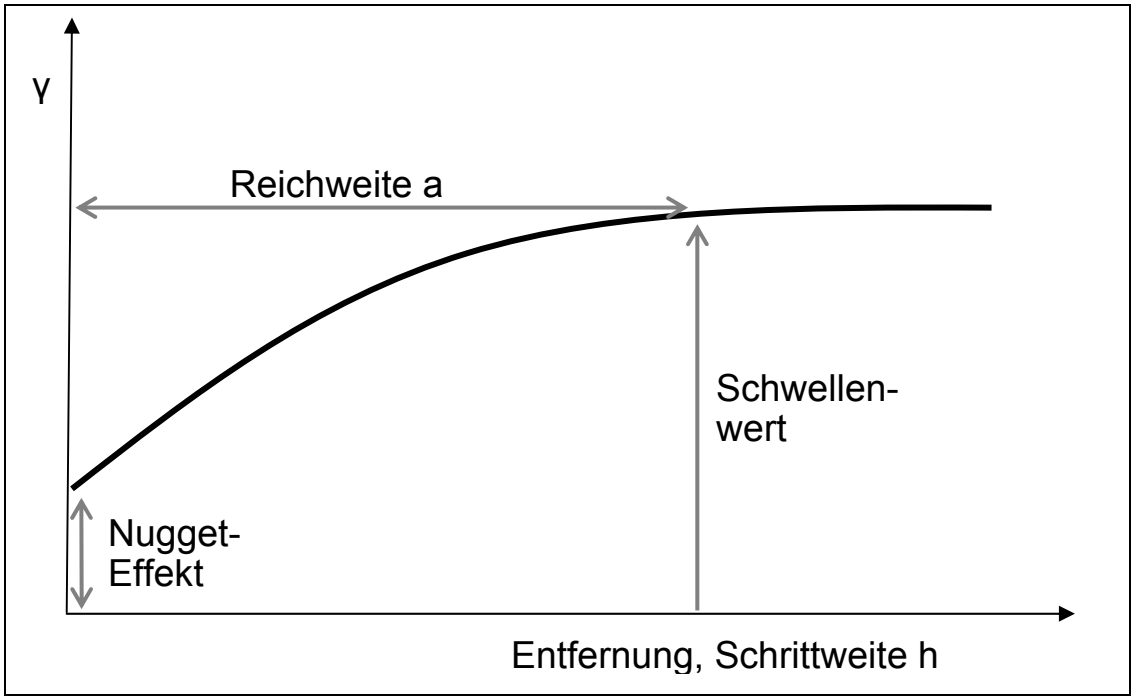


Abbildung 8-4: Exemplarisches Variogramm mit Bezeichnung der geostatistischen Kenngrößen

(5) Die Punkte, für die ein Wert simuliert werden soll, sind durch die Diskretisierung des Modellgebietes vorgegeben. Durch das diskretisierte Modell wird ein Zufallsweg generiert, der alle Zellen (Punkte) enthält, für die ein Wert simuliert werden soll.

(6) Die Indikatorvariable i wird im Punkt x durch die nach Gleichung (8 – 3) gewichteten Indikatorwerte der benachbarten Umgebungsdaten mittels Indikator-Kriging geschätzt. Der Schätzwert i* beträgt:

$$i^*(x) = \sum_{i=1}^{n} \ell_\alpha \cdot i(x_i) \qquad (8 - 5)$$

Bei dieser Gleichung ist ℓ_α das Kriging-Schätzgewicht. Es wird das Kriging-Gleichungssystem aufgestellt und gelöst. Details dazu sind Anlage 5, Blatt 5-8 beigefügt.

(7) Es werden Zufallswerte für den Punkt x_i mit einem Zufallsgenerator gezogen. Diese Werte entsprechen der jeweiligen lokalen Verteilungsfunktion. Die Verteilungsfunktion ist durch die relative Häufigkeit einer jeden Klasse vorgegeben. Die lokale Verteilungsfunktion charakterisiert außerdem die Variabilität einer Größe in einem Teilbereich des gesamten Modellgebietes. Dieser Teilbereich kann durch die jeweils benachbarten Zellen eines Punktes begrenzt sein.

Für die Schritte (5) bis (7) steht Software, wie beispielsweise Geostatistical Library (GSLIB), DEUTSCH & JOURNEL (1992) zur Verfügung.

8.2.3.2 Vorgehensweise

Die vorgestellten Betrachtungen im Kapitel 4 und 5 belegen, dass die chemo-lithotrophe Denitrifikation für das Gebiet Wehnsen der dominierende Umsatzprozess ist. Dieser kann beispielsweise mit einer Reaktion 1.Ordnung beschrieben werden. Im vorliegenden Fall des Untersuchungsgebietes Wehnsen sind die λ_1-Werte und exemplarisch auch die K-Werte, die ortsabhängigen Variablen, die regionalisiert werden sollen. Die Verwendung der λ-Werten zur Regionalisierung beruht auf zwei Gründen: Mit den Laboruntersuchungen werden Werte für den Glühverlust und Gehalte an reaktivem Material, beziehungsweise λ-Werte bestimmt. Aus den Feldversuchen wurden nur λ-Werte, keine Glühverluste gewonnen. Zweitens können die λ_1-Werte direkt in das numerische Transportmodell implementiert werden.

Der im Modell abzubildende Aquiferabschnitt (Abbildung 8-2) schließt den Standort der Bohrung W2122 ein, an dem 20 Bohrkerne entnommen worden sind. Außerdem befindet sich im modellierten Abschnitt die Messstelle 2009, an der ein Tracerversuch durchgeführt worden ist. Bei der hier vorgestellten Regionalisierung von Kennwerten des Nitratumsatzes im Grundwasserleiter wird folgendermaßen verfahren:

I. Zusammenstellen der vorhandenen Daten (λ_1-Werte), die für den zu modellierenden Aquiferabschnitt aus Untersuchungen am Bohrgut und an Vorfeldmessstellen im Feld zur Verfügung stehen:

Die Datenbasis der λ_1-Werte setzt sich wie folgt zusammen:

(a) Es werden die aus der Nitratelimination im Batchversuch an Bohrkernen abgeleiteten λ_1-Werte der 6 Versuche W1, W2, W9 bis W12 verwendet, siehe Anlage 2, Blatt 2-32.

(b) Am Sediment sämtlicher Bohrkerne wurde der Glühverlust bestimmt. Für die 14 Bohrkerne, an deren Material keine Batchversuche durchgeführt worden sind, können λ_1-Werte aus dem Glühverlust über eine lineare Regression bestimmt werden:

$$\lambda_1[mg \cdot kg \cdot d^{-1}]N = 0{,}144 \cdot \text{Glühv.}[\%] - 0{,}07 \qquad (8-6)$$

Gütekriterien der Regressionsgleichung: MAE = 0,05 $[mg \cdot kg \cdot d^{-1}]N$, NRMS = 2,75% . Die berechneten Werte sind in Anlage 5, Blatt 5-3 zu finden.

(c) Weitere 2 Zellen des Rasters in Abbildung 8-2 können durch die Ergebnisse des Feldversuches an Messstelle 2009 aus der gemessenen Denitrifikation, D_{in_situ}, über lineare Regression ermittelten werden. Die zugehörige Regressionsbeziehung ist in Kapitel 5, Tabelle 5-5 enthalten. Die gemessenen und berechneten λ-Werte sind in Anlage 5, Blatt 5-3 enthalten.

Die verwendeten λ-Werte sind durch die Anpassung einer Ausgleichsfunktion an die Ergebnisse der Labor und Feldversuche oder infolge der Berechnung aus dem Glühverlust über Regressionsgleichungen mit Fehlern behaftet. Diese Fehler müssten im Rahmen des Regionalisierungsverfahrens weiterhin berücksichtigt werden. Da in der vorliegenden Arbeit lediglich ein Weg aufgezeigt werden soll, um Punktinformationen zum N-Umsatz zu regionalisieren, werden diese Fehler im Folgenden nicht weiter berücksichtigt.

Im diskretisierten Aquiferausschnitt sind somit insgesamt 22 der 2000 Zellen mit λ_1-Werten belegt. Das entspricht 1,1% der vertikalebenen Gesamtfläche des in Abbildung 8-2 betrachteten Abschnittes. Diese λ_1-Werte der Punkte x_i auf der vertikalebenen Modellfläche werden entsprechend Punkt III „Klassenbildung…“ den definierten Klassen zugeordnet.

II. Zusammenstellen von allen verfügbaren Daten des Untersuchungsgebietes:

Es werden alle verfügbaren Daten des hydraulisch aktiven und vornehmlich reduzierenden Milieus des Untersuchungsgebietes Wehnsen verwendet. Die vorhandenen Daten von λ_1 aus den 3 Bohrungen (W2113, W2122 und W2123) und 3 Tracerversuchen (W2009, W2012 und W2112) wurden in der bestehenden Form, als auch logarithmiert zur Basis 10, auf Normalverteilung geprüft. Dabei wurde einerseits die gesamte Datenreihe getestet. Andererseits wurde zwischen den einzelnen Bohrungen unterschieden. Die Ergebnisse, beigefügt in Tabelle A5-1 in Anlage 5, Blatt 5-1 zeigen, dass eine Normal- oder Log-Normalverteilung nur für einige Datensätze angepasst werden kann. Die Ausgangsdaten sind in Anlage 5, Blatt 5-3 enthalten.

III. Klassenbildung und Bestimmung der relativen Häufigkeit:

Für die Simulation diskreter Variablen ist es notwendig, Klassen festzulegen, DEUTSCH & JOURNEL (1992). Für die Bildung von Klassen und entsprechend für die nachfolgenden Simulationen werden alle vorhandenen Daten für das reduzierende Milieu mit $K \geq 10^{-6} m \cdot s^{-1}$ verwendet. Dies umfasst Daten aus Batchversuchen, die aus dem Glühverlust generierten Daten und die Ergebnisse der Tracerversuche.

Die vorhandenen Daten werden in 4 Klassen aufgeteilt. Die Auswirkung unterschiedlicher Klassenaufteilungen wird im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersucht, da eine Aufteilung der Daten in Klassen unabhängig vom Untersuchungsumfang ist. Die Klassen werden nach Gleichung (8 - 3) mit einer Häufigkeit p* versehen.

Jede Klasse wird durch einen Wert gekennzeichnet, der für die jeweilige Zelle in das numerische Modell eingeht. Dafür kann beispielsweise der Median, der Modal- oder der arithmetische Mittelwert verwendet werden. Im vorliegenden Fall wurde der arithmetische Mittelwert gewählt, der aus den Daten einer jeden Klasse bestimmt worden ist.

Die Tabelle 8-3 enthält die festgelegten Intervallgrenzen der Klassen, das arithmetische Mittel aus den Werten der jeweiligen Klasse und die relative Häufigkeit der einzelnen Klassen.

Tabelle 8-3: Intervallgrenzen, Mittelwerte und Häufigkeit der λ_1- Werte

Intervallgrenzen [a^{-1}]	Mittelwert[1)] MW(k) [a^{-1}]	s [a^{-1}]	n	p*(k) [2)]
Klasse 1: $0 \leq \lambda_1 < 10$	1,6	± 2,4	56	0,77
Klasse 2: $10 \leq \lambda_1 < 20$	15	± 2,2	11	0,15
Klasse 3: $20 \leq \lambda_1 < 30$	24	± 2,9	5	0,07
Klasse 4: $30 \leq \lambda_1 < 40$	32	--	1	0,01

1) Mittelwert der Werte einer Klasse, basierend auf Daten in Anlage 3, Blatt 3-5
2) p*…relative Häufigkeit der Klasse k nach Gleichung (8-3)

Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse wird auch die Verteilung der hydraulischen Parameter berücksichtigt, siehe Abschnitt 8.2.4.3. Die K-Werte werden ebenfalls in 4 Klassen unterteilt. Die Intervallgrenzen und dazugehörigen Mittelwerte sind in Tabelle A5-2, Anlage 5, Blatt 5-1 angegeben. Geht eine heterogene Verteilung der K-Werte in das numerische Modell ein, so sind auch die Werte für n_e und n_{ges} entsprechend zu variieren. In Tabelle A5-2a sind deshalb ebenfalls die angesetzten Werte für n_e angegeben, aus denen über die in Tabelle 8-2 genannte Gleichung n_{ges} berechnet werden kann.

IV. Bestimmung der räumlichen Varianz:

Die räumliche Varianz von Daten kann mit einem Variogramm beschrieben werden. Für das Gebiet Wehnsen liegen Informationen zur horizontalen Varianz (x-y-Ebene) nur von drei Bohrungen vor. Aus nur drei Punktdaten kann aber ein Variogramm nicht berechnet werden. Für die Kenngrößen des Variogramms, wie Reichweite ($a_{horizontal}$) oder Nugget-Effekt, müssen deshalb Annahmen getroffen werden. Die Wirkung dieser Annahmen wird im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse untersucht.

Für die z-Richtung werden für die jeweiligen gemessenen, beziehungsweise generierten λ-Werte experimentelle Variogramme mit der Schrittweite von 1 Meter berechnet. An diese werden geeignete Variogramm-Modelle angepasst und dafür die Kenngrößen $a_{vertikal}$ und Nuggeteffekt bestimmt. Für 2 Bohrungen im Gebiet Wehnsen erlaubte die vorhandene Datenmenge die Berechnung experimenteller Variogramme. An diese Daten wurde jeweils ein Exponentielles Variogramm-Modell angepasst. In den Abbildungen A5-1 und A5-2 der Anlage 5, Blatt 5-2 ist das experimentelle Variogramm von λ_1 für die Bohrung W2122 und W2123, jeweils mit den angepassten exponentiellen Variogramm-Modellen enthalten. Die angepassten Variogramm-Modelle zeigen für beide Bohrungen eine Reichweite von $a_{vertikal} > 5$ m in vertikaler Richtung, siehe auch Abbildung 8-4. Anhand der experimentellen Variogramme kann ein Nuggeteffekt vermutet werden. Eindeutigere Aussagen sind anhand dieser Variogramme nicht möglich. Im Hinblick auf das Ziel, die Wirkung unterschiedlicher räumlicher Verteilungen (Realisationen) der λ-Werte, basierend auf unterschiedlichen geostatistischen Parametern, zu untersuchen, werden verschiedene Annahmen für diese Parameter getroffen. Diese sind in Tabelle 8-4 aufgezeigt. Die deutlichen Unterschiede zwischen horizontaler und vertikaler Reichweite beruhen dabei auf der Annahme, dass in vertikaler Richtung (z-Richtung) ein stärkerer Wechsel geologischer Eigenschaften auftritt, als in horizontaler Richtung, siehe auch SCHAFMEISTER (1999).

Tabelle 8-4: Annahmen für geostatistische Eingangsparameter für Realisationen

Nugget-Effekt[1)]	($a_{vertikal}$)[1)]	($a_{horizontal}$)[1)]	Anzahl der Realisationen	Bezeichnung der Realisationen[2)]
0	5 m	50 m	3	SIS 1* - 3
0	5 m	500 m	3	SIS 4 - 6
0	5 m	5 m	3	SIS 7 - 9
0	10 m	50 m	3	SIS 10 - 12
0	1 m	50 m	3	SIS 13 - 15
0.5	5 m	50 m	3	SIS 16* - 18

[1)]für ein exponentielles Variogramm-Modell, beim Nuggeteffekt wird hier aufgrund der geringen Datendichte nicht zwischen horizontaler und vertikaler Richtung unterschieden [2)]Bezeichnung der Realisation, SIS steht dabei für Sequentielle Indikatorsimulation; Beispiel Zeile 1: SIS 1 – 3 sind die 3 Realsationen SIS 1, SIS 2 und SIS 3. *Darstellungen sind in Abbildung 8-5 enthalten

Basierend auf diesen Ausgangsdaten werden jeweils 3 Realisationen nach dem oben genannten Ablaufschema der Sequentiellen Indikatorsimulation erzeugt. Eine Realisation stellt dabei das Ergebnis, das heißt eine räumliche Verteilung von Parametern, eines Rechenlaufes des Zufallsgenerators dar. Dazu wird die Software GSLIB, DEUTSCH & JOURNEL (1992), verwendet. Drei Realisationen werden für jede der getroffenen Annahmen bezüglich der geostatistischen Parameter erzeugt. Damit soll die Wirkung unterschiedlicher Realisationen, die auf gleichen Annahmen basieren, im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse untersucht werden.

Für die 22 Zellen mit vorliegenden λ_1-Werten, werden im Rahmen der stochastischen Simulation keine Werte simuliert. Für die übrigen 1978 der 2000 Zellen werden Werte simuliert. Die simulierten Werte, das heißt die Belegung der Gitterzellen mit λ- oder K-Werten, werden direkt in die entsprechende Software zur Transportmodellierung eingelesen.

8.2.4 Sensitivitätsanalyse

8.2.4.1 Grundlagen

Mit einer Sensitivitätsanalyse wird geprüft, wie sich eine Änderung eines Eingangsparameters auf das berechnete Ergebnis auswirkt. Die berechneten Ergebnisse sind im vorliegenden Fall die zeit- und ortsabhängigen Nitratkonzentrationen. Diese werden auch als **modellabhängige Variablen** bezeichnet. Als modellabhängige Variable wurde der Zeitpunkt $t(\beta_{50})$ gewählt, ab dem für einen Beobachtungspunkt (Brunnenpegel) der Grenzwert nach Trinkwasserverordnung (TVO) der Nitratkonzentration von β_{NO3} = 50 $mg \cdot l^{-1}$ überschritten wird. Die Eingangsparameter sind die hydraulische Parameter K und n_e, die Dispersion α_x und der Nitrateintrag β_{in}. Diese Parameter werden als **modellunabhängige Variablen** bezeichnet. Dabei wurden zwei Varianten betrachtet.

<u>Variante 1, homogen aufgebauter Aquiferabschnitt</u>, siehe auch Abschnitt 8.2.4.2.:

Für einen homogenen Aquiferabschnitt wurden die Größen der Eingangsparameter, K-Wert, Porenraum, Dispersion und Nitrateintrag, im Rahmen möglicher Spannweiten variiert, siehe Tabelle 8-2.

Variante 2, heterogen aufgebauter Aquiferabschnitt, siehe auch Abschnitt 8.2.4.3.:

Die Auswirkungen unterschiedlicher räumlicher Verteilungen (Realisationen), beispielsweise des λ_1- oder K-Wertes, auf das berechnete Ergebnis wurden ebenfalls untersucht. Für diesen Fall wurde ein heterogener Aquifer angenommen, siehe auch Abschnitt 8.2.4.3. Die modellunabhängigen Variablen sind in diesem Fall die geostatistischen Parameter, Reichweite und Nuggeteeffekt, die sich auf die erzeugte räumliche Verteilung (Realisation) des jeweiligen Parameters auswirken.

Die Bewertung der Resultate kann qualitativ, über einen Vergleich der Konzentrationsverläufe an bestimmten Beobachtungspunkten erfolgen. Im numerischen Transport-Modell wurden dazu 4 virtuellen Beobachtungspunkte, auch als „Brunnenpegel" bezeichnet, festgelegt, siehe Abbildung 8-2. Für diese Punkte wurden die Konzentrationsverläufe berechnet.

Eine quantitative Bewertung der Resultate kann für die Annahme eines ***homogenen Aquifers*** über die Berechnung eines Sensitivitätskoeffizienten (SK) nach ZHENG & BENNETT (2002) erfolgen:

$$SK_{i,k} = \frac{\partial y_i / y_i}{\partial a_k / a_k} \qquad (8-7)$$

Mit:

δy_i . . . Änderung der modellabhängigen Variablen bezüglich des Vergleichswertes y_i,

δa_k. . . Änderung der modellunabhängigen Variablen bezüglich des Vergleichswertes a_k

Die Auswirkungen unterschiedlicher räumlicher Verteilungen (Realisationen) für einen ***inhomogenen Aquifer*** auf das berechnete Modellergebnis wurden qualitativ bestimmt. Da für unterschiedliche Realisationen keine Änderung der modellunabhängigen Variablen bezüglich eines Vergleichswertes vorgenommen werden kann, kann in diesem Fall ein Sensitivitätskoeffizient nicht berechnet werden. Für die Annahme eines inhomogenen Aquifers wurden deshalb die berechneten Konzentrationsverläufe, die auf unterschiedlichen Realisationen basieren, mit dem Konzentrationsverlauf für einen homogenen Aquifer verglichen.

8.2.4.2 Auswahl der Szenarien – homogener Aquifer (Variante 1)

Es wurde angenommen, dass der betrachtete Aquiferabschnitt vollkommen homogen aufgebaut ist. Von daher wurden jeder Zelle die gleichen Eigenschaften, beziehungsweise Eingangsparameter zugeordnet. Es wurden Berechnungen mit dem numerischen Transport-Modell für die in Tabelle 8-5 angegebenen Szenarien (1a bis 9) durchgeführt. Die modellunabhängigen Vergleichswerte (Eingangsparameter) enthält Szenario 0. Die modellabhängigen Vergleichswerte (zeitabhängige Konzentrationen) wurden mit den Annahmen des Szenarios 0 berechnet. Wie anhand der Tabelle 8-5 ersichtlich ist, wurde in jedem Szenario immer nur ein Parameter variiert. Beispielsweise wurde in den Szenarien 2 und 3 der K-Wert verändert, die Werte λ_1, n_e, α_z und β_{in} bleiben dem Szenario 0 gleich. Wurden die Parameter K_x, α_x oder n_e variiert, so erfahren auch die Parameter K_z, α_z und n_{ges} eine Veränderung über die Gleichungen, die in Tabelle 8-2 angegeben sind.

Wird für jede Zelle der genannte Mittelwert für λ_1-Wert von 5,576 a^{-1} angesetzt, siehe Anlage 5, Blatt 5-1, so wird an den virtuellen 4 Beobachtungspunkten dieses Modells eine Nitratkonzentration von $\beta(NO_3)$ = 0 $mg \cdot l^{-1}$ berechnet. In der Berechnung wird das zugeführte Nitrat somit vollständig eliminiert. Deshalb sind Sensitivitätsuntersuchungen mit λ_1-Werten dieser Größenordnung nicht möglich. Da im vorliegenden und folgenden Abschnitt die Wirkungs-

weise der λ_1-Werte und deren räumlicher Verteilung gezeigt werden sollen, wurden die ermittelten λ_1-Werte reduziert. Für die Sensitivitätsbetrachtung wird der genannte Mittelwert von λ_1= 5,576 a^{-1} um den Faktor 100 reduziert:

$$\lambda_1' = 0{,}01 \cdot \lambda_1 \qquad (8 - 8)$$

Mit diesen Werten λ_1' kann im Modell einen Nitratdurchbruch erzielt werden.

Tabelle 8-5: Eingangsparameter der Szenarien– homogener Aquifer

variierter Parameter	Eingangsparameter					Szenario
	λ_1 1) [a^{-1}]	K_x [$m \cdot s^{-1}$]	n_e [-]	α_x [m]	β_{in} [$mg \cdot l^{-1}$ NO_3^-]	
--	0	$6 \cdot 10^{-4}$	0,2	10	200	0
λ_1	5,576	$6 \cdot 10^{-4}$	0,2	10	200	1
	0,056	$6 \cdot 10^{-4}$	0,2	10	200	1a
K_x	0	$6 \cdot 10^{-5}$	0,2	10	200	2
	0	$6 \cdot 10^{-3}$	0,2	10	200	3
n_e	0	$6 \cdot 10^{-4}$	0,15	10	200	4
	0	$6 \cdot 10^{-4}$	0,25	10	200	5
α_x	0	$6 \cdot 10^{-4}$	0,2	5	200	6
	0	$6 \cdot 10^{-4}$	0,2	100	200	7
β_{in}	0	$6 \cdot 10^{-4}$	0,2	10	100	8
	0	$6 \cdot 10^{-4}$	0,2	10	150	9

1) Wird λ_1= 5,576a^{-1} (Mittelwert, siehe Anlage 5, Blatt 5-1) so wird das zugeführte Nitrat auf der Fließbahn vom Eintragsort bis zu den Beobachtungspegeln vollständig eliminiert, so dass als Basiswert λ_1 = 0 angesetzt worden ist.

8.2.4.3 Auswahl der Szenarien – heterogener Aquifer (Variante 2)

Es wurde im vorangegangenen Abschnitt bereits gesagt, dass in keinem der 4 Beobachtungspunkte des Modells eine Nitratkonzentration nachweisbar ist, wenn λ_1 = 5,576 a^{-1} angesetzt wird. Für die Betrachtung der Auswirkung einer räumlichen Verteilung von Kennwerten des Nitratumsatzes auf die berechnete Nitratkonzentration wurde die Klassenaufteilung der λ_1-Werte nach Tabelle 8-3 beibehalten, allerdings wurden die darin angegebenen Werte nach Gleichung (8 – 8) reduziert. In Tabelle A5-4, Anlage 5, Blatt 5-4 sind die λ_1'-Werte enthalten.

Es wurde untersucht, welchen qualitativen Einfluss die räumliche Verteilung der λ_1'-Werte auf den berechneten Konzentrationsverlauf ausübt. Dazu wurden unterschiedliche räumliche Verteilungen (Realisationen) nach Abschnitt 8.2.3.2 erzeugt. Diese Realisationen der λ_1'-Werte basierten dabei auf den Eingangsdaten: vertikale Reichweite $a_{vertikal}$, (z-Richtung), horizontale Reichweite $a_{horizontal}$, (x-Richtung) und dem Nugget-Effekt.

In Tabelle 8-6 sind die Szenarien 10 bis 15 enthalten, die Grundlage für die jeweiligen Realisationen der räumlichen Verteilung der λ_1'-Werte bilden, dargestellt. Für jede Variation der Eingangsparameter wurden jeweils drei Realisationen erzeugt. Für Szenario 10 sind dies die drei unterschiedlichen Realisationen (räumlichen Verteilungen) SIS 1, SIS 2 und SIS 3.

Tabelle 8-6: Szenarien der Eingangsparameter für die räumliche λ_1'-Wert-Verteilung - heterogener Aquifer

Variierter Parameter	Szenario	Bezeichnung der Realisation	Eingangsparameter für die Simulation		
			$a_{vertikal}$ [m]	$a_{horizontal}$ [m]	Nuggeteffekt
$a_{vertikal}$	10	SIS 1 – 3	5	50	0
	11	SIS 10 – 12	10	50	0
	12	SIS 13 – 15	1	50	0
$a_{horizontal}$	13	SIS 4 – 6	5	500	0
	14	SIS 7 – 9	5	5	0
Nuggeteffekt	15	SIS 16 – 18	5	50	0,5

Die Variation der geostatistischen Parameter in Tabelle 8-6 erfolgte dabei innerhalb möglicher Spannweiten. Beispielsweise wurde angenommen, dass die horizontale Reichweite einer geologischen Eigenschaft zwischen 5 m und 500 m variieren kann. Die vertikale Reichweite hingegen wurde aufgrund einer vertikalen Schichtenfolge als geringer, hier zwischen 1 m und 10 m, angenommen.

Das Zusammenspiel von hydraulischer Leitfähigkeit K und λ_1'-Werten wird anhand der Szenarien 16 und 17 untersucht, siehe Tabelle 8-7. Die räumliche Verteilung der λ_1'-Werte wurde nicht verändert, bleibt jeweils gleich SIS 1 (Tabelle 8-4). Variiert wurde an dieser Stelle die horizontale Reichweite ($a_{horizontal}$) innerhalb möglicher Spannweiten. Dazu gingen Realisationen des K-Wertes, basierend auf der Klasseneinteilung nach Tabelle A5-2, Anlage 5, Blatt 5-1 in das numerische Modell ein. An die Aufteilung der K-Werte in Klassen ist eine entsprechende Aufteilung der Werte von n_e geknüpft. Diese ist in Tabelle A5-2a in Anlage 5, Blatt 5-1 enthalten. Auf weitere Szenarien wurde verzichtet, da nur exemplarisch das Wirken unterschiedlicher räumlicher Verteilungen des K-Wertes gezeigt werden sollte.

Tabelle 8-7: Szenarien der Eingangsparameter für Realisationen der K- und n_e-Wert-Verteilung

Szenario	Bezeichnung	$a_{vertikal}$ [m]	$a_{horizontal}$ [m]	Nugget-Effekt	Verteilung von λ_1'
16	SIS A – C	5	500	0	entspricht Szenario 10, SIS 1
17	SIS D	5	5	0	entspricht Szenario 10, SIS 1

8.3 Ergebnisse

8.3.1 Regionalisierung mit stochastischen Simulationsverfahren

Für die unterschiedlichen Szenarien nach Tabelle 8-6 und Tabelle 8-7 wurden unterschiedliche, mögliche räumliche Verteilungen (Realisationen) erzeugt. Zwei Realisationen, basierend auf unterschiedlichen geostatistischen Parametern, sind in Abbildung 8-5 enthalten. Es handelt sich dabei um die Realisation SIS 2 (Szenario 10) und die Realisation SIS 16 (Szenario 15), siehe Tabelle 8-6. Bei Szenario 10 war der Nugget-Effekt mit 0 angesetzt worden, bei Szenario 15 mit 0,5. Auf eine weitere Darstellung von Realisationen wird an dieser Stelle verzichtet.

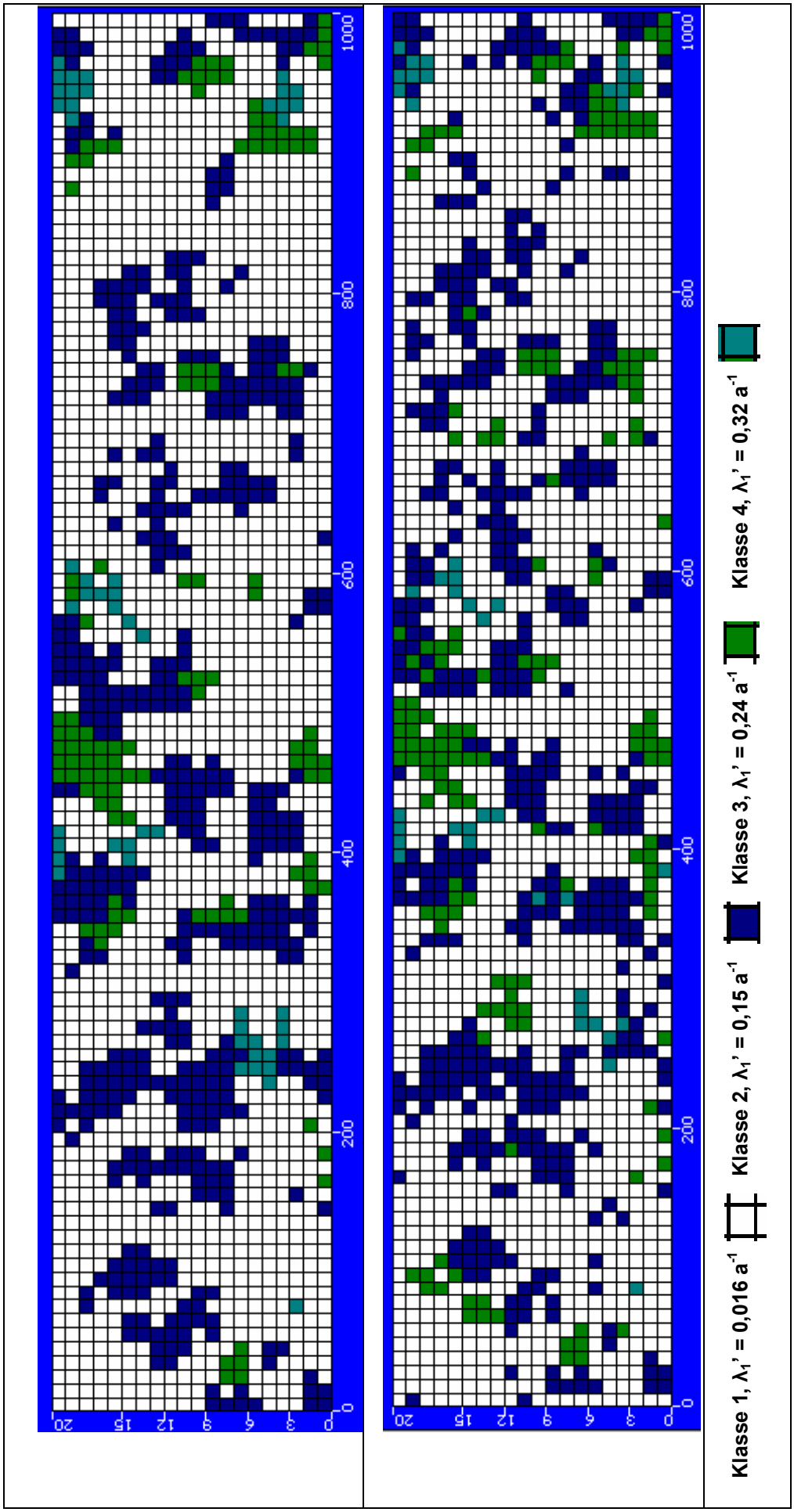


Abbildung 8-5: Flächige (vertikal-ebene) Verteilungen von λ_1 –Werten für einen exemplarischen Aquiferausschnitt: Szenario 2, Realisation SIS 1 (oben) und Szenario 15, Realisation SIS 16 (unten)

8.3.2 Modellierung

Ergebnisse – homogener Aquifer

Szenario 0:

In Abbildung 8-6 sind die Ergebnisse der Berechnung des zeitlichen Verlaufs der Nitratkonzentration basierend auf den Werten des Szenarios 0 nach Tabelle 8-5 angegeben. Die modellabhängigen Parameter, $t(\beta_{50})$, betragen für die Brunnenpegel 1 bis 4 zwischen 3 und 14,5 Jahren.

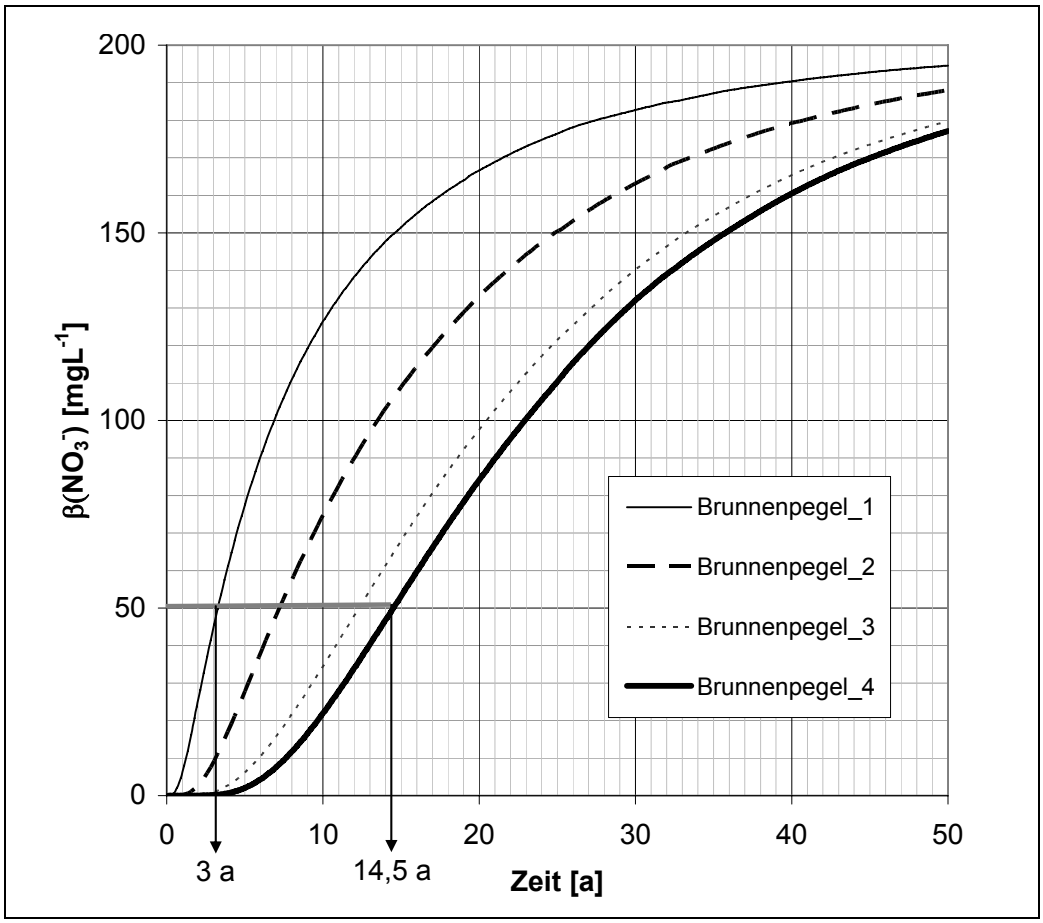


Abbildung 8-6: Entwicklung der Nitratkonzentration in den Beobachtungspegeln des Modells für Szenario 0

Szenarien 1 bis 9:

Die Abbildung 8-7 zeigt den Konzentrationsverlauf des Nitrates an den Beobachtungspegeln 1 und 4 für die Szenarien 1a bis 9 nach Tabelle 8-5. Als Vergleich dazu ist Szenario 0 angegeben. Die unterschiedlichen Szenarien bewirken verschiedene Zeitpunkte des Überschreitens der Marke von β_{NO3} = 50 mg·l^{-1}. Für Brunnenpegel 1 liegen diese innerhalb einer Zeitspanne von 4,5 Jahren: Für Szenario 4 mit n_e = 0,15 (Szenario 4) wird bereits nach 2,5 Jahren die Konzentration von β_{NO3} = 50 mg·l^{-1} überschritten. Für Szenario 8 mit einem Eintrag von β_{in} = 100 mg·l^{-1} erfolgt die Überschreitung dieser Konzentration erst nach 7 Jahren. Im Pegel 4 liegt zwischen erster Grenzwertüberschreitung (Szenario 7) und letzter Überschreitung (Szenario 1a) eine Zeitspanne von etwa 19 Jahren.

Sensitivitätskoeffizienten wurden jeweils für die einzelnen Brunnenpegel und Varianten berechnet. Die Eingangswerte und Resultate sind in Tabelle A5-5 bis A5-8, Anlage 5, Blatt 5-4 und 5-5 enthalten. Eine grafische Darstellung der absoluten Beträge der Sensitivitätskoeffizienten ist für die Szenarien 2 bis 9, nach Tabelle 8-5 in Anlage 5, Blatt 5-6 gegeben. Danach ist die Auswirkung von Porenraum, Dispersion und Nitrateintrag höher, als die des K-Wertes.

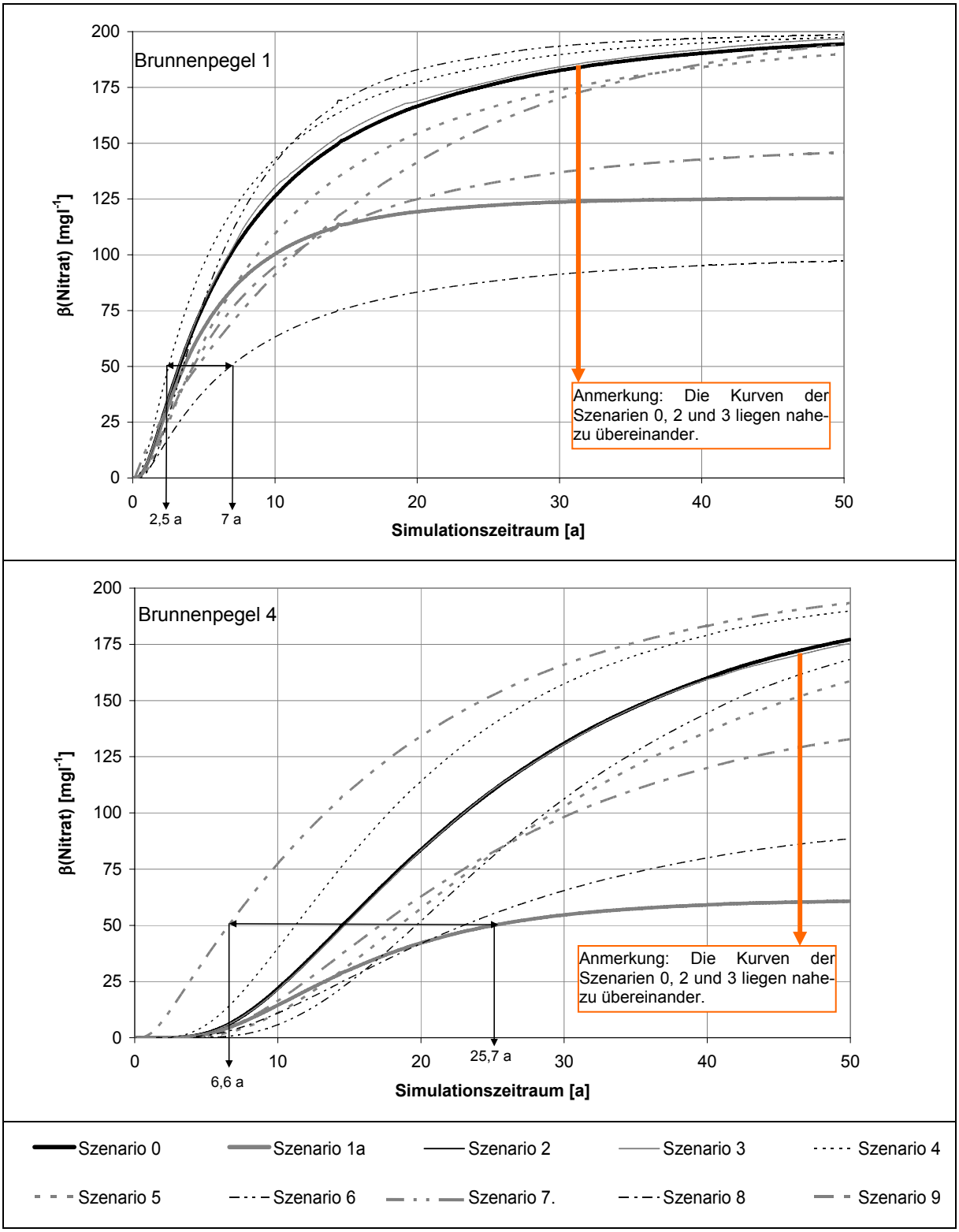


Abbildung 8-7: Berechnete Konzentrationsverläufe in Abhängigkeit ausgewählter Parameter – homogener Aquifer, Szenarien 1 bis 9

Ergebnisse – heterogener Aquifer

Wirkung unterschiedlicher geostatistischer Parameter

In Abbildung 8-8 sind die Auswirkungen variabler geostatistischer Parameter dargestellt. Die Darstellungen beinhalten jeweils die berechneten Konzentrationsverläufe für je 3 Realisationender Szenarien 1a und 10 bis 15. Für den Vergleich wird Szenario 1a herangezogen, da darin ein N-Umsatz mit λ_1' berücksichtigt wird, wie bei den Szenarien 10 bis 15.

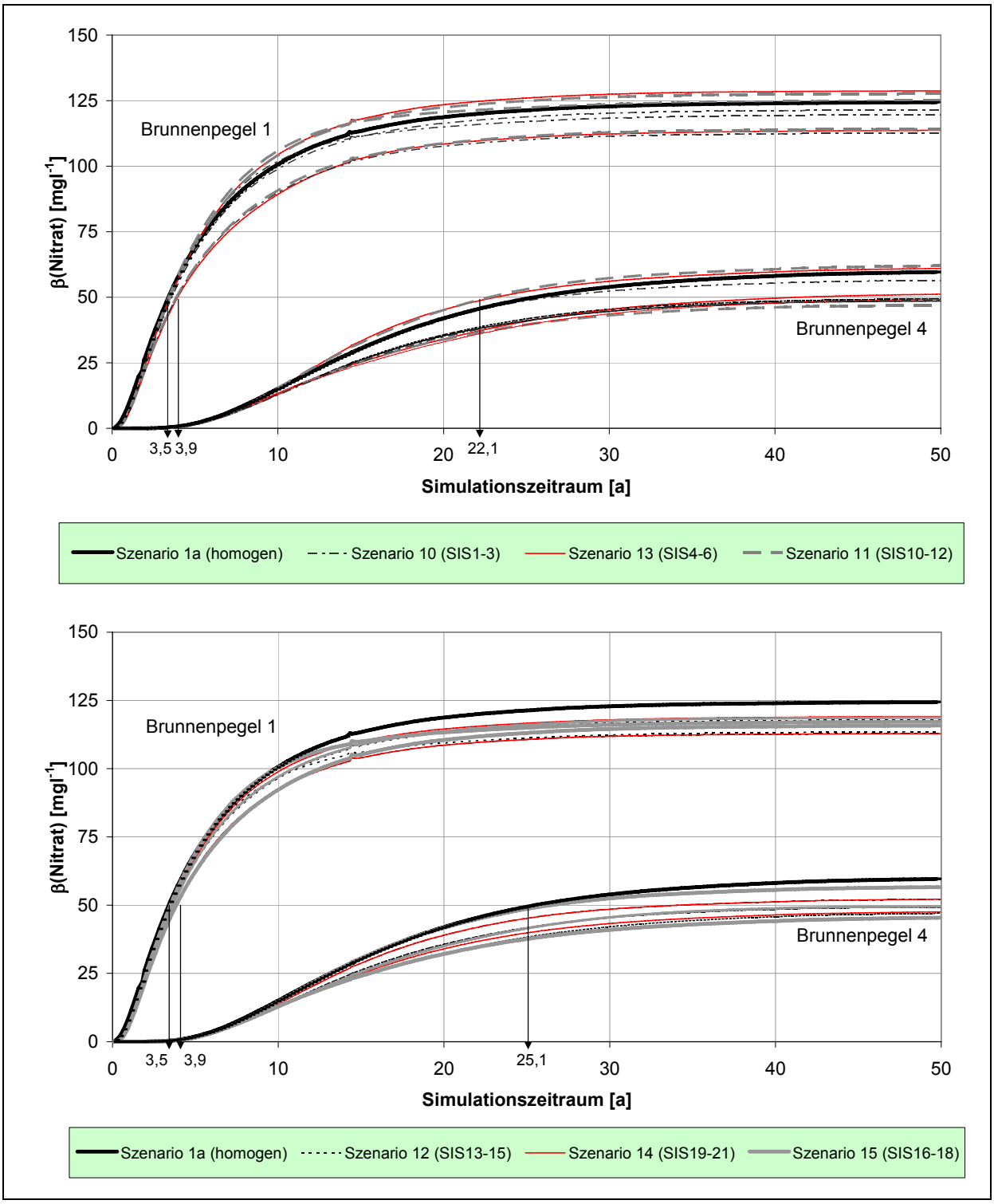


Abbildung 8-8: Berechnete Konzentrationsverläufe in Abhängigkeit geostatistischer Parameter

Die Abbildung zeigt, dass die einzelnen, für die unterschiedlichen Szenarien berechneten Konzentrationsverlaufe sehr ähnlich sind und die einzelnen Linien teilweise aufeinander liegen und sich somit schwer voneinander abgrenzen lassen. Die Auswirkung unterschiedlicher Szenarien auf den berechneten Konzentrationsverlauf ist gering.

Die einzelnen Konzentrationsverläufe sind in dieser Abbildung auch weniger entscheidend - da auch schwierig voneinander zu unterscheiden - betont werden soll die Spannweite, innerhalb der β_{NO3} = 50 mg·l^{-1} überschritten wird. Im vorliegenden Fall wird für Brunnenpegel 1 zwischen 3,5 und 3,9 Jahren nach Simulationsbeginn diese Konzentration überschritten. Die Spannweite beträgt etwa 0,4 Jahre und ist somit gering.

Für den Beobachtungspunkt Brunnenpegel 4 wird nach etwa 25 Jahren der Grenzwert von 50 mg·l^{-1} von einer der 3 Realisationen des Szenarios 15 überschritten. Bis zum Ende des Darstellungszeitraumes von 50 Jahren, wird der Grenzwert jedoch nicht von allen Kurvenverläufen überschritten. Die Spannweite beträgt demnach mehr als 25 Jahre.

Auswirkung einer heterogenen K-Wertverteilung

Die Werte der hydraulischen Leitfähigkeit K und des effektiven Porenraumes wurden, ähnlich wie die λ_1-Werte in 4 Klassen unterteilt. Jede Klasse wird durch einen Mittelwert repräsentiert, der in das Transportmodell eingeht. Die Werte sind in Tabelle A5-2, Anlage 5, Blatt 5-1 enthalten. Für diese Klassenaufteilung wurden unterschiedliche Realisationen der Verteilung der K- und n_e-Werte erzeugt. Die Abbildung 8-9 enthält die berechneten Ergebnisse, die auf den Realisationen für die hydraulischen Parameter K und n_e nach Szenario 16 beruhen.

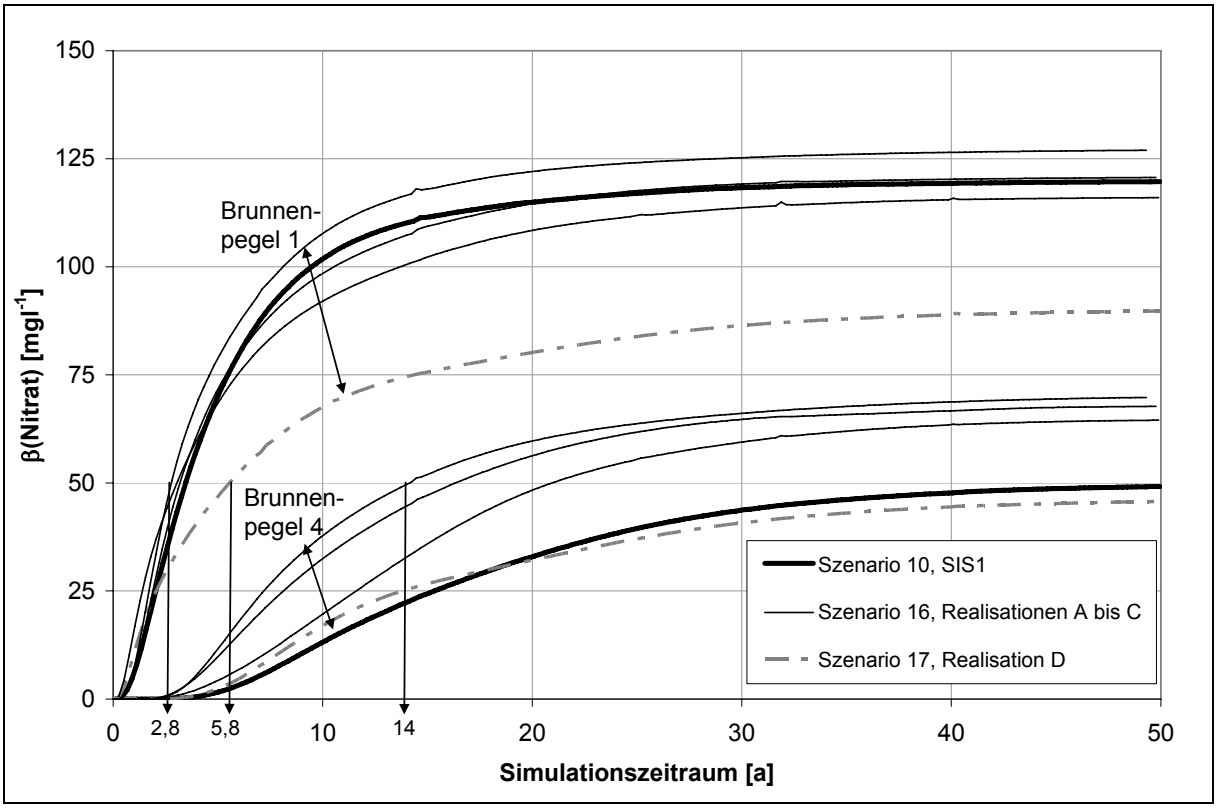


Abbildung 8-9: Berechnete Konzentrationsverläufe in Abhängigkeit unterschiedlicher K- und n_e- Wertverteilungen

Die geostatistischen Parameter für die räumliche Verteilung der hydraulischen Parameter sind in Tabelle 8-7 angegeben. Die λ_1'-Werte waren bei dieser Berechnung wie in Szenario 10 (SIS1) heterogen verteilt. Szenario 10, Realisation SIS 1 dient somit als „Vergleichs-

Szenario“. Szenario 17 zeigt die Konzentrationsverläufe für eine Variation der geostatistischen Parameter. Außerdem enthält die Darstellung die Verläufe entsprechend Szenario 10, das heißt mit konstanten Werten für die hydraulischen Parameter. Abgebildet sind wiederum Zeitpunkte, ab denen die Konzentration β_{NO3} = 50 mg·l^{-1} in den Punkten 1 und 4 überschritten wird.

8.4 Diskussion und Bewertung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde ein Weg aufgezeigt, wie Punktinformationen mit stochastischer Simulation regionalisiert und in ein numerisches Transportmodell übertragen werden können. Bei den einzelnen Arbeitsschritten im Zuge der Regionalisierung treten Fehler auf. Als Fehler sind in diesem Zusammenhang Abweichungen zwischen Messwert und Schätzwert eines Parameters zu verstehen. Beispielsweise sind Daten, die über eine Regressionsgleichung ermittelt worden sind, mit einem Fehler behaftet. Ebenso kann durch die Einteilung der Daten in Klassen und deren Repräsentanz durch einen Mittelwert ein Fehler hervorgerufen werden. In dieser Arbeit blieben diese Fehler (Abweichungen) unberücksichtigt, um die Vorgehensweise übersichtlich darzustellen.

Die Ergebnisse sind berechnete Konzentrationsverläufe. Die Transportberechnungen basieren auf unterschiedlichen Szenarien, sowohl für die Größenordnung ausgewählter Parameter, als auch für deren räumliche Verteilung (Realisation). Wird ein homogener Aquifer angenommen, so kann nur ein Konzentrationsverlauf berechnet werden. Werden für verschiedene Realisationen Berechnungen durchgeführt, werden mehrere Konzentrationsverläufe berechnet. Entsprechend der Anzahl der Rechenläufe kann dann für einen bestimmten Konzentrationsverlauf eine relative Häufigkeit bestimmt werden, je nachdem, wie viele Realisationen diesen Verlauf berechnen, das heißt, wie viele Kurven sich überlagern. Daraus kann die Wahrscheinlichkeit des Eintretens dieses Konzentrationsverlaufes bestimmt werden. Aufgrund der vergleichsweise geringen Anzahl berechneter Konzentrationsverläufe wurde in dieser Arbeit auf eine solche Angabe verzichtet. Der praktische Nutzen dieser Vorgehensweise ist offensichtlich: Anstelle eines berechneten, gegebenenfalls jedoch unsicheren Konzentrationsverlaufes, werden mit einer Kurvenschar, die für unterschiedliche Realisationen berechnet wurde, der wahrscheinlichste (häufigste) Verlauf und mögliche Abweichungen angegeben.

Mit dem Transportmodell wurde die Wirkung der Variation ausgewählter Parameter auf die berechneten Konzentrationsverläufe bestimmt. Zum einen wurden die Parameter K-Wert, effektiver Porenraum, Nitrateintrag und Dispersion innerhalb möglicher Spannweiten, jedoch ohne räumliche Heterogenität, variiert. Zum anderen bildeten unterschiedliche räumliche Verteilungen (Realisationen) von K- und λ_1-Werten die Basis für die Transportberechnungen.

Als erstes Resultat ist festzuhalten, dass die ermittelten λ_1-Werte nach Kapitel 4 und 5, so hoch sind, dass im vorliegenden 2D-Modell die angesetzte Nitratkonzentration von maximal β_o = 200 mg·l^{-1} für den berechneten Zeitraum von 50 a nahezu vollständig abgebaut wird. Es wurde bereits dargelegt, dass dieses Ergebnis keineswegs so auf das natürliche Aquifer-System übertragen werden kann, da im Modell mit zeit-unabhängigen Abbaukennwerten gerechnet wird. Im Feld jedoch werden durch den Verbrauch verfügbarer Reduktionsmittel auch die Reaktionskennwerte verringert. Um dies zu berücksichtigen wäre ein Multi-Spezies-Ansatz notwendig, der hier nicht zur Verfügung stand und dessen Entwicklung auch nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist.

Als besonders wirkungsvolle Parameter wurden hier unter für die Annahme eines **homogen aufgebauten Aquiferabschnittes** die Dispersion, der Nitrateintrag und der nutzbare Porenraum identifiziert, siehe Abbildung A5-3 in Anlage 5, Blatt 5-6. Dabei ist festzuhalten, dass die Wirkung der Größe des Nitrateintrages mit zunehmender Beobachtungstiefe (Lage der fiktiven Brunnenpegel) abnimmt, siehe auch Abbildung 8-7. Dies ist plausibel, da mit zunehmender Fließstrecke der Eintrag von anderen Effekten, wie der Dispersion, überlagert wird. Die Wirkung der Dispersion nimmt mit zunehmender Tiefe zu. Erwartungsgemäß ist für eine Berechnung des Nitrattransportes neben den Umsatzkennwerten λ auch die Kenntnis hydraulischer Parameter, der Dispersion und des Nitrateintrages notwendig. Für das vorliegende Beispiel erscheint die Wirkung des K-Wertes auf die berechnete Konzentration gering. Bei jeder der durchgeführten Modellrechnungen wird der Aquiferabschnitt von der gleichen Wassermenge, nämlich dem neu gebildetem Grundwasser, durchflossen. Wird der K-Wert verändert muss sich zwangsläufig ein verändertes hydraulisches Gefälle ausbilden, um den Durchfluss zu gewährleisten. Die Auswirkung unterschiedlicher K-Werte kann mit dem hier verwendeten Modellansatz nicht geprüft werden.

Die Berechnung von Konzentrationsverläufen basierend auf einer **räumlich heterogenen Verteilung der λ-Werte** dargestellt in Abbildung 8-8, zeigt folgende Resultate:

- Eine räumlich variable λ_1'-Verteilung wirkt sich auf den Konzentrationsverlauf aus. Eine heterogene Verteilung von Kennwerten des Nitratumsatzes sollte in einem Transportmodell deshalb berücksichtigt werden.
- Unterschiedliche Realisationen gleicher Szenarien überlagern die Effekte von variierenden geostatistischen Parametern ganz oder teilweise. Die Auswirkung der geostatistischen Parameter ist im vorliegenden Beispiel demnach relativ gering. Somit muss die Bestimmung der räumlichen Varianz eines Parameters (Variogramm) nicht vordergründiger Gegenstand eines Untersuchungsprogrammes sein.

Eine variierende räumliche **Verteilung der hydraulischen Parameter n_e und K** übt eine starke Wirkung auf den Konzentrationsverlauf des Nitrates in den Beobachtungspegeln aus, siehe Abbildung 8-9. Folgende Überlegung unterstreicht die Notwenigkeit, die räumliche Verteilung von Umsatzkennwerten im Zusammenhang mit hydraulischen Eigenschaften zu betrachten: In einem Lockergesteinsaquifer sind unterschiedliche geologische Schichten anzutreffen. Da diese sich auch in ihren hydraulischen Eigenschaften unterscheiden können, ist davon auszugehen, dass sich selbst in einem, augenscheinlich als „sandig“ eingestuften, Aquiferabschnitt bevorzugte Fließbahnen ausbilden. Entlang dieser Fließbahnen werden demzufolge die verfügbaren Reduktionsmittel stärker aufgebraucht, als in den hydraulisch weniger aktiven Bereichen. Um dies bei der Berechnung von Konzentrationsverläufen zu berücksichtigen, wäre ein reaktiver Multi-Spezies-Ansatz notwendig. Eine hohe räumliche Auflösung von λ_1-Werten in numerischen Modellen ist nur dann sinnvoll, wenn gleichzeitig die Variationsbreite der hydraulischen Kennwerte berücksichtigt wird. Dazu sollten Werte für K und n_e im Labor und Feld (Pumpversuch) ermittelt werden.

9 Schlussbetrachtung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden Ergebnisse von Untersuchungen im Labor und Feld zur Identifizierung und Quantifizierung von Denitrifikation in drei norddeutschen Grundwasserleitern vorgestellt. Es handelt sich dabei um Teileinzugsgebiete der Wasserwerke Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde, Fassung A.

In den Gebieten Sulingen und Wehnsen wurden Bohrungen bis maximal 60 m u GOK abgeteuft, wobei gestörte und ungestörte Sedimentproben gewonnen wurden. Für diese Sedimentproben wurden im Labor hydraulische Parameter (K-Werte) und die Gehalte der Reduktionsmittel organischer Kohlenstoff und Sulfidschwefel bestimmt. Die Ergebnisse zeigen, dass in hydraulisch aktiven Sanden der Grundwasserleiter Reduktionsmittel vorliegen, die den Ablauf einer chemo-organotrophen und chemo-lithotrophen Denitrifikation ermöglichen. Die Laborversuche (Batchversuche) an diesen Sedimentproben zeigten eine unterschiedlich starke Nitratelimination an. Ein Vergleich der Nitratelimination und der gebildeten N-Reaktionsprodukte der Denitrifikation (N_2, N_2O und NO_2^-) ergab, dass die Denitrifikation der dominierende N-Umsatzprozess ist. Für zahlreiche Versuchsansätze lässt der beobachtete Anstieg der Sulfatkonzentration auf den Ablauf einer chemo-lithotrophen Denitrifikation schließen. Für einige Sedimentproben wurde die Sorption von Nitrat nachgewiesen, wobei diese hier mit maximal 0,85 $mg \cdot kg^{-1}N$ quantitativ bedeutungslos ist. Untersuchungsbedarf besteht an der Entwicklung einfacher, kostengünstiger mikrobiologischer Methoden, mit der die Art der aktiven Denitrifikanten und somit die Art der Denitrifikation bestimmt werden kann.

Für den Anstrom zahlreicher Vorfeldmessstellen wurde die tatsächlich ablaufende Denitrifikation anhand von Gasmessungen (N_2/Ar-Verhältnis) nachgewiesen. Die Ergebnisse belegen, dass in einigen Messstellen bisher nur deshalb sehr geringe oder keine Nitratkonzentrationen gemessen worden sind, weil die zugeführte Nitratmenge durch Denitrifikation umgesetzt wird. Da meist nur ein Teil der stöchiometrisch verfügbaren Reduktionsmittel auch biologisch verfügbar ist, kann nicht gesagt werden, wie lange diese Prozesse noch wirkungsvoll ablaufen werden. Das heißt, auch bei nachgewiesener Denitrifikation besteht die zwingende Notwendigkeit, Nitrateinträge in das Grundwasser zu vermeiden. Die Ergebnisse der hier vorgestellten Untersuchungen können beispielsweise in Kombination mit numerischen Strömungs- und Transportmodellen helfen, Flächen zu identifizieren, für die besonders dringend Schutzbestimmungen eingehalten werden müssen.

Zur Bestimmung der möglichen Denitrifikation im Aquifer wurde eine Einbohrloch-Tracermethode weiterentwickelt und angewendet. Die vorliegenden Daten zeigen einen Zusammenhang zwischen Tracer- und Laborversuchen. Zukünftig empfiehlt es sich, diese Tracerversuche an neu errichteten Messstellen einzusetzen und am erbohrten, teufentreuen Sediment Labohrversuche durchzuführen, um diesen Zusammenhang für unterschiedliche Gebiete zu bestätigen. Ist eine größere Datengrundlage geschaffen, kann die Tracermethode großräumig an Vorfeldmessstellen zur Abschätzung der Denitrifkation und des Vorrates an Reduktionsmitteln eingesetzt werden.

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Weg gezeigt, wie Punktinformationen zum N-Umsatz in die Fläche mit Hilfe stochastischer Simulation übertragen werden können. Mit einem numerischen 2D-Transportmodell wurde die Auswirkung unterschiedlicher räumlicher Verteilungen von Parametern den berechneten zeitlichen Konzentrationsverlauf des Nitrates untersucht. Die Anwendung stochastischer Simulation ist eine Alternative gegenüber geostatistischen

Interpolationsverfahren, wie beispielsweise dem Kriging. Für die praktische Anwendung weißt die hier durchgeführte Transportmodellierung jedoch zu viele Vereinfachungen auf. Dies betrifft insbesondere die Annahme eines zeitlich unveränderlichen Umsatzkennwertes. Die Arbeit zeigt demnach den Bedarf an einem transparenten Multi-Spezies-Reaktionsmoduls, welches den Verbrauch an Reduktionsmitteln beim Ablauf von Denitrifikation bei der Transportberechnung berücksichtigt.

Literaturverzeichnis

A

Addy, K., D. Q. Kellogg, A. J. Gold, P. M. Groffman, G. Ferendo & C. Sawyer (2002): in situ push-pull method to determine ground water denitrification in riparian zones, journal of environmental quality, Vol. 31, 1017-1024.

An, S. & W. S. Gardner (2002): Dissimilatory nitrate reduction to ammonium (DNRA) as a nitrogen link, versus denitrification as a sink in a shallow estuary (Laguna Madre/Baffin Bay, Texas), Marine ecology progress series, Vol. 237, 41-50.

Apello, C.A.J. & D. Postma (1996): Geochemistry, groundwater and pollution, A.A.Balkema/Rotterdam/Brookfield

Azouzi, B. & J. Schröter (2003): Regionalisiersung der Transmissivität mit Fuzzy-Kriging in der Region Mitidja (Algerien), Grundwasser, Heft 4, Band 8, Springer

B

Bear, J. (1972): Dynamics of Fluids in Porous Media, Dover Publications

van Beek, C.G.E.M. (2000): Redox Processes Active in Denitrification.– in: Schüring, S., Schulz, H.D., Fischer, W.D., Böttcher, J., Duynisveld, W.H.D. [Eds.]: Redox – Fundamentals, Processes and Application.– 152-160, Berlin (Springer).

Behm, R. (1988): Untersuchungen zur Bestimmung der leicht umsetzbaren N- und C-Anteile im Heißwasserextrakt des Bodens – Kurzmitteilung. Arch. Acker- Pflanzenbau Bodenkd., Berlin 32 5, S.333-335.

Bengtsson, G.& C. Bergwall (1995):. Heterotrophic denitrification potential as an adaptive response in groundwater bacteria, FEMS Microbiology Ecology 16, 307-318.

Betlach, M. R. & J. M. Tiedje (1981): Kinetic explanation for accumulation of nitrize, nitric oxide, and nitrous oxide during bacterial denitrification, applied and environmental microbiology, Vol. 42, No. 6, 1074-1084.

Beyer, W. (1964): Zur Bestimmung der Wasserdurchlässigkeit von Kiesen und Sanden aus der Kornverteilung. – Wasserwirtschaft – Wassertechnik (WWT): 165-169; Berlin

Bieske, E. (1998): Bohrbrunnen, R. Oldenbourg Verlag München, Wien

Binnerup, S. J., K. Jensen, N. P. Revsbech, M. H. Jensen & J. Soerensen (1992): Denitrification, Dissimilatory reduction of nitrate to ammonium, and nitrification in a bioturbated estuarine sediment as measured with ^{15}N and microsensor techniques, applied and environmental microbiology, Vol. 58, No. 1, p. 303-313.

Blackmeer, A.M. & J.M. Bremner (1978): Inhibitory effect of nitrate on reduction of nitrous oxde to molecular nitrogen by microorganisms, Soil Biology & Biochemistry, Vol. 19, 187-191.

Blair, G.J., R.D.B. Lefroy & L. Lisle (1995): Soil Carbon Fractions based on their degree of oxidation and the development of a carbon management index for agricultural systems. Austral. Jour. Agric. Res., 46, p.1459-1466.

Blicher-Mathiesen, G., G. W. McCarty & L. P. Nielsen (1988): Denitrification and degassing in groundwater from dissolved dinitrogen and argon, Journal of hydrology, Vol. 208, 16-24.

Böhlke, J. K. & J. M. Denver (1995): Combined use of groundwater dating, chemical, and isotopic analyses to resolve the history and fate of nitrate contamination in two agricultural watersheds, Atlantic coastal plain, Maryland, Water ressoures research, Vol. 31, No. 9, 2319-2339.

Böhlke, J.-K. (2002): Groundwater recharge and agricultural contamination, Hydrogeology Journal, Vol. 10, Springer, 153-179.

Bonin, P., P. Omnes & A. Chalamet (1998): Simutaneous occurrence of denitrification and nitrate ammonification in sediments of the French Mediterranean Coast, Hydrobiologia 389, 169-182.

Bonin, P. & V. Michotey (2005): Effect of oxygen on the copetition between denitrification and nitrate ammonification: COST Action 856: Ecological Aspects of Denitrification, with emphasis on agriculture – Padua, Italy April 6-10.

Borchers, U. (1993): Erfassung und Charakterisierung von Substraten in pleistozänen Aquiferen sowie deren Verwertbarkeit für die mikrobielle Nitratreduktion, Cuvillier Verlag Göttingen

Böttcher, J., O. Strebel & M. Duysniveld (1989): Kinetik und Modellierung gekoppelter Stoffumsetzungen im Grundwasser eines Lockergesteins-Aquifers. Geol. Jahrbuch Reihe C, Heft 51, 1-40.

Böttcher, J., O. Strebel, S. Voerkelius & H.-L. Schmidt (1990): Using isotope fractioning of nitrate-nitrogen and nitrate-oxygenfor evaluating of microbial denitrification in a sandy aquifer, Journal of hydrology, Vol. 114, 413-424.

Böttcher, J., O. Strebel, W.H. M. Duynisveld & E.O. Frind (1991): Reply on comment of S.F. KOROM on „Modeling of multicomponent transport with microbial transformation in groundwater: the Fuhrberg case". Water Ressources Research, Vol. 27, 3275-3278.

Busch, K.-F., L. Luckner & K. Tiemer (1993): Geohydraulik, Gebrüder Bornträger Berlin Stuttgart

C

Cahn, M. D., D. R. Bouldin & M.S Cravo(1992): Nitrate sorption in the profile of an acid soil, Plant and Soil 143, Iss. 2, 179-183.

Capilla, J.E., J.J. Gómez-Hernández & A. Sahuquillo (1997): Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data 2. demonstration on synthetic aquifer, Journal of Hydrology, 175-188

Carle, S.F., B.K. Esser & J.E. Moran (2006): High-resolution simulation of bain-scale nitrate transport considering aquifer system heterogeneity, Geosphere, Geological society of america, Volume 2, No. 2, 195-209.

Chiang, W.-H., W. Kinzelbach & R. Rausch (1998): Aquifer Simulation Model for Windwos. Groundwater Flow and Transport Modeling, an integrated programm. Gebrüder bortraeger Verlagsbuchhandlung, Berlin.

Chodak, M., P. Khanna & F. Beese (2003): Hot Water extractable C and N in relation to microbiological properties of soils under beech forests. Biology & Fertility of Soils 39, p.123-130.

Clay, D. E., Z. Zheng, Z. Liu, S. A. Clay & T. P. Trooien (2003): Bromide and Nitrate Movement through Undisturbed Soil Columns, Journal of Environmental Quality 22: 338-342.

Clement, T.P. (1997): RT3D - A Modular Computer Code for Simulating Reactive Multi-Species Transport in 3-Dimensional Groundwater Systems, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington.

Clément, J.-C., R. Holmes, B. J. Peterson & G. Pinay (2003): Isotopic investigation of denitrification in a riparian ecosystem in western France, Journal of applied ecology, Vol. 40, 1035-1048, British ecological society.

Cole, J. A., & C. M. Brown (1980): Nitrite reduction to ammonia by fermentative bacteria: a short circuit in the biological nitrogen cycle. FEMS Microbiol. Lett. Vol. 7, 65–72.

Cook, P. & A.L. Herczeg (2001): Environmental tracers in subsurface hydrology, Kluwer academic publishers.

D

Deutsch, C.V. & A.G. Journel (1992): GSLIB, Geostatisticals software library and user's guide, Oxford university press.

Deutsch, C.V. & M. Schnetzler (2006): Statios LLC is an international company that provides software, training, and consulting in spatial statistics; http://wwwstatios.com

Diersch, H.-J. (1992): Feflow, Interactive, graphics-based finite element simulation of groundwater contamination processes, Advances in Engineering Software, Vol. 15, No. 1, 1992

DVWK (1997): Tiefenorientierte Probennahme aus Grundwassermeßstellen - DVWK Merkblätter 245/1997, Wirtschafts- und Verlagsges. Gas und Wasser, Bonn.

E

Etmann, J. (1991): Nitratdynamik im Sicker- und Grundwasser des Großeinzugsgebietes der Wassergewinnungsanlage Thülsfelde. Diplomarbeit, 1991

F

Firestone, M.K., M.S. Smith & J.M. Tiedje (1980): The influence of nitrate, nitrite and oxygen on the composition of the gaseous products of denitrification in soil. Soil Science Society of America Journal, Vol. 43, 1140-1144

Frimmel, F.H., J. Jahnel & S. Hesse (1998): Characterization of biogenic organic matter (BOM), Water Science & technology, Elsevier, 97-103.

Frind, E.O., W.H.M. Duynisveld, O. Strebel & J. Böttcher (1990): Modelling of multicomponent transport with microbial transformation in groundwater, the Fuhrberg case. Water Resources Research, Vol. 26, 1707-1719.

G

Gisi, U., R. Schenker, R. Schulin, F.X. Stadelmann & H. Sticher (1997) : Bodenökologie, Thieme, Stuttgart/New York.

Goldberg, L.C., I. Hutcheon & N. Wardlaw (1989) : Experiments on transport of hydrophobic particles and gas bubbles in porous media, Transport in porous media 4, Kluwer Academic Publishers.

Gómez-Hernánez, J.J. & S.M. Gorelick (1989) : effective groundwater model parameter values : influence of spatial variability of hydraulic conductivity, leakance, and recharge, Water Resources Research, Vol. 25, 405-419.

Gómez-Hernánez, J.J., A. Sahuquillo & J.E. Capilla (1997) : Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data -I. Theory, Journal of Hydrology, 162-174.

Gómez-Hernánez, J.J. & R.M. Srivastava (1990) : ISIM3D : An ANSI-C three-dimensional multiple indicator conditional simulation program.-Computer & Geosciences, Vol.16, No. 4, 395-440.

van de Graaf, A.A., A. Mulder, P. De Bruijn, M.S.M. Jetten, L.A. Robertson & J.G. Kuenen (1995) : Anaerobic oxidation of ammonium is a biologically mediated process, Applied and Environmental Microbiology, Vol. 61, No. 4, 1246-1251.

Graf, H. & W. Schäfer (2002) : Simulation des Nitrattransports im Einzugsgebiet eines Wasserwerkes, Grundwasser, Bd. 7, Heft 4, Springer, 233-242.

Griggs, E.M., L.R. Kump & J.K. Böhlke (2003) : The fate of wastewater-derived nitrate in the subsurface of the Florida Keys : Key Colony Beach, Florida, Estuarine Coastal and Shelf Science, Vol. 58, Elsevier, 517-539

van Groeningen, J. W., K. B. Zwart, D. Harris & C. v. Kessel (2005): Vertical gradients of $\delta^{15}N$ and $\delta^{18}O$ in soil atmospheric N_2O – temporal dynamics in a sandy soil, RCM Rapid communications in mass spectrometry, Vol. 19, 1289-1295.

H

Hamer, K. & R. Sieger (1994): Anwendung des Modells CoTAM zur Simulation von Stofftransport und geochemischen Reaktionen, Ernst & Sohn, Berlin

Hamme, R. C.: The solubility of neon, nitrogen and argon in distilled water and seawater, Deep Sea Research, (2004)

Hansen, H. C. B., O. Borggaard & J. Soerensen (1994): Evaluation of the free energy of formation of Fe(II)-Fe(III) hydroxide-sulphate (green rust) and its reduction of nitrite, Geochemica et Cosmochimica Acta, Vol. 58, No. 12, 2599-2608.

Hart, S.C. & D.D. Myrold (1996): ^{15}N tracer studies of soil nitrogen transformations. In: Boutton,T. et al. (eds) Mass spectrometry of soils. Marcel Dekker, Inc., New York, pp. 225-245.

Hartog, N., J. Griffioen & C.H. van der Weijden (2002): distribution and reactivity of O_2-reducing components in sediments from a layered aquifer, Environmental science & technology, Vol. 36, No. 11, p. 2338-2344.

Hartog, N. (2003): Reactivity of organic matter and other reductants in aquifer sediments, Geologica Ultraectina, Mededelingen van de Faculteit Geowetenschappen Universiteit Utrecht, No. 228

Hartog, N., P.F. van Bergen, J.W. de Leeuw & J. Griffioen (2004): Reactivity of organic matter in aquifer sediments: geological and geochemical controls, geochimica and cosmochimica acta, Vol. 68, No. 6, pp. 1281-1292, Elsevier.

Heincke, M. & M. Kaupenjohann (1999): Effects of soil solution on the dynamics of N_2O emissions: a review. Nutrient Cycling in Agroecosystems 55, Kluwer Academic Publishers.

Hill, A.R., K.J. Devito, S. Campagnolo & K. Sanmugadas (2000): Subsurface denitrification in a forest riparian zone: Interactions between hydrology and supplies of nitrate and organic carbon, Biochemistry 51, pp. 193-223, Kluwer academic Publishers.

Hiscock, K., A.S. Bateman, I.H. Mühlherr, T. Fukada & P.F. Dennis (2003): Indirect emissions of nitrous oxide from regional aquifers in the United Kingdom, Environmental Science & Technology, Vol. 37, No. 16, 3507-3512.

Hölting, B. (1996): Hydrogeologie. Ferdinand Enke Verlag Stuttgart.

Houben, G. (2000): Modellansätze zur Prognose der langfristigen Enzwicklung der Grundwasserqualität – Fallbeispiel Bourtanger Moor (Emsland), Aachener Geowissenschaftliche Beiträge, Band 36, Fachgruppe der Geowissenschaften der RWTH Aachen

I

Iqbal, M.Z., N. C. Rother & R. F. Spalding (1997): Nitrogen Isotope indicators of seasonal source varibility to groundwater, Environmental Geology, Vol. 32, 210-218.

J

Josopait, V. (1990): Hydrogeologisches Gutachten zur Bemessung und Gliederung eines Wasserschutzgebietes für die Wassergewinnungsanalgen des Wasserwerkes Thplsfelde. Niedersächsiches Landesamt für Bodenforschung, Hannover 1990.

K

Kellog, D.Q., A.J. Gold, P.M. Groffman, K. Addy, M.H. Stolt a& G. Blazejewski (2005): In situ ground water denitrification in stratified, permeable soils underlying riparian wetlands, journal of environmental quality 34, pp. 524-533

Kelso, B. H. L., R. V. Smith, R. J. Laughlin & S. D. Lennox (1997): Dissimilatory nitrate reduction in anaerobic sediments leadings to river nitrite accumulation, Applied and environmtal microbiology, Vol. 6, No. 12, p. 4679-4685.

Kendall, C. & J.J. McDonnell (1998): Isotope tracers in catchment hydrology, Elsevier.

Ketelsen, H. & P. Widmoser (2000): Trend und Verteilungsmuster der Nitratbelastung im Grundwasser des westlichen Geestkerns auf der Insel Föhr, HW 44, H2, 75-87.

Kinzelbach, W. & R. Rausch (1995): Grundwassermodellierung, Gebrüder Borntraeger Berlin, Stuttgart.

Koch, C.B. & H.C. Hansen (1997): Reduction of nitrate to ammonium by sulphate green rust, Advances in geoecology, Vol. 30, 373-393, Catena.

Kölle, W. (2001): Wasseranalysen richtig beurteilt, Wiley-VCH, Weinheim u.a.

Kölle, W. (1999): Einfluss des Grundwasserleiters auf die Grundwasserbeschaffenheit aus der Sicht des Wasserchemikers, das Stoffdepot-Konzept, Mitteilungen des Institutes für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden, Heft 2, Umsatz von Nährstoffen & Reaktionspartnern unterhalb des Wurzelraumes und im Grundwasser.

Kölle, W. (1996): Konzept zur Bewertung des Stickstoff-Umsatzes im Grundwasser, Mitteilungen des Institutes für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden, Heft 1, Grundwasserschutz, Konzepte '96.

Kölle, W., O. Strebel & J. Böttcher (1987): Reduced sulfur compunds in sand aquifers and their interaction with groundwater. Proc. of the Dresden symposium, March 1987, "Groundwater monitoring and management", IAHS Publication 173, p. 23-30

Korom, S.F. (1992): Natural denitrification in the saturated zone: A review, Water Ressources research, Vol. 28, No. 6, 1657-1668.

L

Lack, J. G., S. K. Chaudhuri, R. Chakraborty, L. A. Achenbach & J. D. Coates (2002): Anaerobic biooxidation of Fe(II) by Dechlorosoma suillum, microbial ecology 43, 424-431.

Langguth, H.-R. & Voigt, R. (1988): Hydrogeologische Methoden, Springer

Lind, A.M. (1983): Nitrate reduction in the subsoil, in Denitrification in the nitrogen cycle, edited by H.L. Golterman, 145-156, Plenum New York.

Loginow, W., W. Wisniewski, S.S. Gonet & B. Ciescinska (1987): Fractionation of organic carbon based on susceptibility to oxidation. Polish Journal of Soil Science 20, p.47-52.

Luckner, L. & W.M. Schestakow (1986): Migrationsprozesse im Boden- und Grundwasserbereich, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig

M

Mariotti, A., A. Landreau & B. Simon (1988): ^{15}N isotope biogeochemistry and natural denitrification process in groundwater: application to the chalkaquifer of northern France, Geochimca et Cosmochimica Acta, Vol. 52, 1869-1878.

Mariotti, A. (1994): Denitrification in groundwaters, pronciples and methods for its identification: a review, Journal of hydrology, Vol. 88, 1-23.

Marsily, Gh. De, F. Delay, J. Goncalvès, Ph. Renard, V. teles & S. Violette (2005): dealing with spatial heterogenity, Hydrogeology Journal, IAHS, Springer, Vol. 13, No. 1, 161-183.

Mattheß, G. & K. Ubell (1983): Allgemeine Hydrogeologie - Grundwasserhaushalt - Lehrbuch der Hydrogeologie - Band 1, Gebrüder Borntraeger, Berlin, Stuttgart.

Mayer, K.U. (1999): A numerical model for multicomponent reactive transport in variably saturated porous media. Ph.D. thesis, Department of Earth Sciences, University of Waterloo.

McCarty, G., W. & J. M. Bremner (1993): Effects of Mn^{2+} and Mg^{2+} on assimilation of NO_3^- and NH_4^+ by soil microorganisms, Agricultural Scienes Vol. 90, 9403-9407.

McCready, R.G.L., W.D. Gould & F.D. Cook (1983): Respiratory nitrate reduction by Desulfovbrio sp.

McDonald, M.G. & A.W. Harbaugh (1988): A Modular Three-Dimensional Finite Differenece Groundwater Flow Model. U.S. Geological Survey Technics of Water Ressources Investigations.

McKenny, D.J., K.F. Shuttleworth, J.R. Vriesacker & W.I. Findlay (1982): Production and loss of nitric oxide from denitrification in anaerobic brookston clay, Applied and environmental microbiology, Vol. 43, No. 3, 534-541.

McSwiney, C. P., W. H. McDowell & M. Keller (2001): Distribution of nitrous oxide and regulators of ist production across a tropical rainforest catena in the Luquillo experimental forst, Puerto Rico, Biochemistry, Vol. 56, No. 3, 256-288.

Mehranfar, O. (2003): Laboruntersuchungen zum langfristigen Denitrifikationspotential im oberflächennahen Grundwasser hydromorpher Mineralböden Nordwestdeutschlands, Dissertation der Fakultät für Agrarwissenschaften der Georg-August-Universität Göttingen.

Meon, G., J. Führböter & D. Schönwiese (2005): Inverse groundwater modelling to identify infiltration areas of nitrate containing observation wells by using the ^{3}H-^{3}He groundwater dating method, Leichtweiß-Institut für Wasserbau der Technischen Universität Braunschweig

Meyer, K. & R. Well (2005): Kurzbericht, Messungen zur Denitrifikation im Grundwasser an Grundwassermessstellen in den Wassergewinnungsgebieten Sulingen und Schwaförden – unveröffentlicht –

Michaelis, M. & M.L. Menten (1913): Kinetics of invertase action, Z.Biochem. 49, 333.

Mulder, A., A. A. Van de Graaf, L. A. Robertson & J. G. Kuenen (1994): Anaerobic ammonium oxidation discovered in a denitrifying fluidized bed reactor, FEMS micobiology ecology 16, 177-184.

N

Nävecke, R. & J. Wolff (1993): Stickstoffumsatz im Boden und Grundwasser bei unterschiedlicher Nutzung. Institute für Mikrobiologie und für Geowissenschaften der Technischen Universität Braunschweig. Schlussbericht BMFT-Forschungsvorhaben 02 WT 8826/8

Nömnik, H., D.J. Pluth & J. Melin (1984): Dissimilatory reduction of ^{15}N-labeled nitrate in the presence of nonlabeled NO or N_2O. Canadian Journal of Soil Science, Vol. 64, 21-29.

O

Oliveira, J. R. A. de, Vilela & L. e A. Miguel (2000): Adsorcao de nitrato em solos de cerrado do distrito federal, Pesq. Agropec. Bras., Brasilia p.1199-1205.

Oster, H. (2001): Spurenstoffuntersuchungen an Meßstellen bei Thülsfeld, Auftragsarbeit, Spurenstofflabor Wachenheim – unveröffentlicht.

Ostrom, N. E., L. O. Hedin, J. C. von Fischer & G. P. Robertson (2002): Nitrogen transformations and NO_3^- removal at a soil-stream interface: a stable isotope approach, Ecological applications, Vol. 12,No. 4, 1027-1043.

Ottley, C. J., W. Davison & W. M. Edmunds (1997): Chemical catalysis of nitrate reduction by iron(II), Geochemica et Cosmochimica Acta, Vol. 61, No. 9, 1819-1828.

P

Parkhurst , D.L., D.C. Thorstensen & L.N. Plumer (1980): Phreeqe – a computer program for geochemical calculations, U.S. Geological Survey, Water Ressources Investigation 80 (96).

Pätsch, M. (2006): Analyse des Depots des Nitratumsatzes und dessen Heterogenität im quartären Grundwasserleiter der Wasserwerkes Thülsfeld / Emsaland, Berücksichtigung bei der Modellierung des Transportes, Dissertation, Fakultät für Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften der Technischen Univerität Dresden.

Pauwels, H., W. Kloppmann, J.-C. Foucher, A. Martelat & V. Fritsche (1998): Field tracer test for denitrification in a pyrite-bearing schist aquifer, Applied geochemistry, Vol. 13, No. 6, 767-778.

Pedersen, J.K., P.L. Bjerg & Th. H. Christensen (1991): Correlation of nitrate profiles with groundwater and sediment characteristics in a shallow sandy aquifer, Journal of Hydrology, Vol. 124, Elsevier, 263-277.

Postma, D. & C. Boesen (1991): Nitrate reduction in an unconfined sandy aquifer: Water chemistry, reduction processes, and geochemical modelling, Water resources research, Vol. 27, No. 8, 2027-2045.

Puckett, L.J. & T.K. Cowdery (2002): Transport and fate of nitrate in a glacial outwash aquier in relation to groundwater age, land use practices, and redox processes, Journal of environmental quality, Vol. 31, 782-796.

R

Rödelsberger, M., U. Rohmann, F.H. Frimmel & H. Sontheimer (1992): Untersuchungen zur natürlichen Denitrifikation im Grundwasserleiter und deren Einfluss auf die Grundwasserzusammensetzung, in Schadstoffe im Grundwasser, DFG Forschungsbericht, Hrsg. H. Kobus, VCH, 231-276

Rößner, U. (1996): Kinetik mikrobieller Stoffumwandlungsprozesse im Grundwasserleiter mit Hilfe von Labormodellen, Proceedings des Dresdner Grundwasserforschungszentrums e.V., Heft 10

Rohmann, U. & H. Sontheimer (1985): Nitrat im Grundwasser, DVGW-Forschungsstelle am Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe (TH)

S

Sánchez-Pérez, J. M., C. Bouey, S. Sauvage, S. Teissier, I. Antiguedad & P. Vervier (2003): A standardised methode for measuring in situ denitrification in shallow aquifers : numerical validation an measurments in riparian wetlands, Hydrology and Erath systems sciences, Vol. 7, 87-96.

Schäfer, D, W. Schäfer & R. Therrien (1998): TBC Transport, Biochemistry an Chemistry, Heidelberg

Schäfer, W. (1999): Numerische Modellierung des reaktiven Nitrattransportes im Grundwasser – Stand der Modellentwicklung, Mitteilungen des Institutes für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden, Heft 2

Schäfer, W. & F. Wendland (2005): Integriertes Monitoring des chemischen Zustandes des Grundwassers / Sachstand und Ergebnisse des Vorprojekts im Pilotgebiet Lager Hase, Fortbildung in der Niedersächsischen Wasserwirtschaftsverwaltung am 11.10. in Hildesheim.

Schafmeister, M.-Th. (1999): Geostatistik für die hydrogeologische Praxis, Springer

Scheffer, F. & P. Schachtschabel (1998): Lehrbuch der Bodenkunde, 14. Auflage, Ferdinand Enke Verlag Stuttgart.

Schlegel, H.G. (1992): Allgemeine Mikrobiologie, Georg Thieme Verlag Stuttgart

Shi, Y., M.D. Zwolinski, M.E. Schreiber, J.M. Bahr, G.W. Sewell & W.J. Hickey (1999): Molecular analysis of microbial community structures in pristine and contaminated aquifers: field and laboratory microcosm experiments, Applied and environmental microbiology, 2143-2150, American society for microbiology.

Smith, R.L., B.L. Howes & J.H. Duff (1991): Denitrification in nitrate-contaminated groundwater: Occurrence in steep vertical geochemical gradients, Geochimica et cosmochimica acta, Vol. 55, 1815-1825.

Smith, R. L., S. P. Garabedian & M. H. Brooks (1996): Comparison of denitrification activity measurements in ground water using cores and natural gradient tracer tests, Environmental science and technology, Vol. 30, 3448-3456.

Smith, R.L., Miller, D.N., Brooks, M.H., Widdowson, M.A. & M.W. Killingstad (2001): In situ stimulation of groundwater denitrification with formate to remediate nitrate contamination, Environmental Science and Technology, Vol. 35, 196-203.

Smith, R.L., J.K. Böhlke, S.P. Garabedian, K.M. Revesz & T. Yoshinari (2004): Acessing denitrification in groundwater using natural gradient tracer tests with ^{15}N: In situ measurement of a sequential multistep reaction, Water Ressources research, Vol. 40 W07101.

Soerenson, J. & L. Thorling (1991): Stimulation by lepidocrite (γ-FeOOH) of Fe(II)-dependent nitrite reduction, Geochemica et Cosmochimica Acta, Vol. 55, 1289-1294.

Sommer, Th. (2000): Grundwasserdynamik und Grundwasserbeschaffenheit in der anthropogen überprägten Flussaue der Unstrut, Proceedings des Dresdner Grundwasserforschungszentrums e.V., Heft 20

Sparling, G., M. Vojvodic-Vukovic & L.A. Schipper (1998): Hot-watersoluble C as a simple measure of labile soil organic matter: the relationship with microbial biomass C. Soil Biology & Biochemistry 30, p.1469–1472.

Spitz, K. & J. Moreno (1996): A practical guide to groundwater and solute transport modelling, Wiley-Verlag.

Sposito (1998): Bodenchemie. Übers. Von A. Eifert, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 1998. (Originalausgabe: „The Chemistry of Soils“, Oxford University Press, 1989.).

Springob, G., J.Böttcher & W. H. M. Duijnisveld (1999): Exkursion G9, Sandige Böden und deren Wasser- und Stoffhaushalt unter Acker und Nadelwald im Fuhrberger Feld. Deutsche Bodenkundliche Gesellschaft, Jahrestagung Hannover.

Storm, R. (1974): Wahrscheinlichkeitsrechnung, mathematische Statistik und statistische Qualitätskontrolle, VEB Fachbuchverlag Leipzig

Straub, K. L., M. Benz, B. Schink & F. Widdel (1996): Anaerobic, nitrate-dependent microbial oxidation of ferrous iron, applied and environmental microbiology, Vol. 62, No. 4, 1458-1460.

Straub, K. L. & B. E. E. Buchholz-Cleven (1998): Enumeration and detection of anaerobic ferrous iron-oxidizing, nitrate-reducing bacteria from diverse european sediments, applied and environmental microbiology, Vol. 64, No. 12, 4846-4856.

Strebel, O., Böttcher, J. & W.H.M. Duynisveld (1992): Identifizierung und Quantifizierung von Stoffumsetzungen in einem Sand-Aquifer (Beispiel Fuhrberger Feld).– DVGW

Strous, M., J. G. Kuenen & M. S. M. Jetten (1999): Key physiology of anaerobic ammonium oxidation, applied and environmental microbiology, Vol. 65, No. 7, 3248-3250.

Stute, M. & P. Schlosser (2001): Atmospheric noble gases, in Environmental tracers in subsurface hydrology, 349-377.

T

Thayalakumaran, T., P.B. Charlesworth, K.L. Britow, R.J. van-Bemmelen & J. Jaffrés (2004): Nitrate and ferrous iron concentration in the lower Burdekin aquifers: assessing denitrifikation potential, SuperSoil 2004: 3rd Australian New Zealand Soils Conference, 5 – 9 December.

Trimmer, M., J. C. Nicholls & B. Deflandre (2003): Anaerobic ammonium oxidation measured in sediments along the thames estuary, united kingdom, applied and environmental microbiology, Vol. 69, No. 11, 6447-6454.

Trudell, M.R., R.W. Gillham & J.A. Cherry (1986): An in-situ study of the occurence and rate of denitrification in a shallow unconfined sand aquifer, Journal of Hydrology, Elsevier, 251-268.

W

Wachter, Th., F. Dethlefsen, S. Gödeke & A. Dahmke (2004): Räumlich-statistische Charaktersierung der Hydrogeochemie einer BTEX-Grundwasserkontamination am Standort „Retzina“/Zeitz, Grundwasser, Band 9, Heft 1, 21-32.

Walther, W. (1999): Diffuser Stoffeintrag in Böden und Gewässer, B.G. Teubner, Stuttgart, Leipzig

Walther, W., M. Pätsch, D. Weller (2002): Untersuchung des vertikal differenzierten Stickstoffumsatzes in der gesättigten Zone und der Lebensdauer der Nitratelimination, im Einzugsgebiet der Fassung A, Wasserwerk Thülsfelde, Auftragsarbeit für den Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverband, Institut für Grundwasserwirtschaft der Technischen Universität Dresden.

Walther, W., Ch. Konrad, & R. Well (2004): Durchführung von Tracerversuchen an Vorfeldmessstellen im Einzugsgebiet des Wasserwerkes Thülsfelde, Fassung A, Abschlussbericht einer Auftragsarbeit für den OOWV, Institut für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden – unveröffentlicht.

Walther, W., Ch. Konrad, Th. Reimann, D. Marre, D. Geyer & R. Well (2005): Untersuchungen zum N-Umsatz im Wassergewinnungsgebiet Wehnsen, Abschlussbericht einer Auftragsarbeit für den WV Peine, Institut für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden – unveröffentlicht.

Walther, W., Ch. Konrad & R. Well (2005a): Untersuchungen zum N-Umsatz im Wassergewinnungsgebiet Sulingen, Abschlussbericht einer Auftragsarbeit für den WV SULINGER LAND, Institut für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden – unveröffentlicht.

Walther, W., Ch. Konrad, D. Marre, & R. Well (2005b): Gasmessungen und Isotopenuntersuchungen an Vorfeldmessstellen im Gesamteinzugsgebiet des Wasserwerkes Thülsfelde, Abschlussbericht einer Auftragsarbeit für den OOWV, Institut für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden – unveröffentlicht.

Weber, K.A., F.W. Picardal & E.E. Roden (2001): Microbially catalyzed nitrate-dependent oxidation of biogenic solid-phase Fe(II) compounds, Environmental science & technology, Vol. 35, No. 8, 1644-1650.

Weiss, R. F. (1970): The solubility of nitrogen, oxygen and argon in water and seawater, Deep Sea Research, Vol. 17, 721-735.

Well, R. & D.D. Myrold (1999): Laboratory evaluation of a new method for in situ measurement of denitrification in water-saturated soils, Soil biology & biochemistry 31, Pergamon, 1109-1119.

Well, R., J. Augustin, J. Davis, S. M. Griffith, K. Meyer & D. D. Myrold (2001): Production and transport of denitrification gases in shallow groundwater, Nutrient cycling in agroecosystems, Vol. 60, 65-75.

Well, R. & D.D. Myrold (2002): A proposed method for measuring subsoil denitrification in situ, soil science society American journal, Vol. 66, 507-518.

Well, R., J. Augustin, K. Meyer & D.D. Myrold (2003): Comparison of field and laboratory measurement of denitrification and N_2O production in the saturated zone of hydromorphic soils, Soil biology & biochemistry 35, Pergamon, 783-799

Well, R., H. Höper, O. Mehranfar & K. Meyer (2005): Denitrification in the saturated zone of hydromorphic soils – laboratory measurement, regulating factors and stochastic modelling, Soil biology & biochemistry 37, Elsevier, 1822-1836.

Wendland, F. (1999): Das Nitratabbauvermögen im Grundwasser des Elbeeinzugsgebietes, Analyse von Wasserhaushalt, Verweilzeiten und Grundwassermilieu im Flusseinzugsgebiet der Elbe (Deutscher Teil), Abschlussbericht Teil 2, Forschungszentrum Jühlich GmbH.

Wichmann, K., T. Nuber & J. Kiekbusch (2003): Numerische Modellierung des reaktiven Sulfattransportes, inHandbuch Wasserversorgung und Sulfatbelastung des Grundwassers, Hrsg. Nestler, W. & Th. Grischek, im Auftrag des BMBF, 107-129.

Widory, D., E. Petelet-Giraud, P. Négrel & B. Ladouche (2005): Tracking the sources of nitrate in groundwater using coupled nitrogen and boron isotopes: a synthesis, Environmental science and Technology, Vol. 39, 539-548.

Wlodarczyk, T., W. Stepniewski & M. Brzezinska (2005): Nitrous oxide production and consumption in Calcaric Regosols as related to soil redox and texture, Interantional agrophysics, Vol. 19, 263-271.

Wriedt, G. (2004): Modelling of nitrogen transport and turnover during soil and groundwater passage in a small lowland catchment of Northern Germany. Dissertation

WV SULINGER LAND (2003): Jahresbericht für das hydrologische Abflussjahr 2002 sowie zusammenfassende Bewertung der hydrologischen Zusammenhänge der letzten Jahre für die Wasserwerke „Sulingen“ und „Schwaförden“ (Wasserversorgung SULINGER LAND); Auftragsarbeit Rogge & Co. Hydrogeologie GmbH, Dr. Grube, Schweitzer, Görlich – unveröffentlicht -

WV Peine (1998): Hydrogeologischer Jahresbericht 1998 für das Wasserwerk Wehnsen Auftragsarbeit Rogge & Co. Hydrogeologie GmbH, Dr. Rogge, Stengel – unveröffentlicht –

WV Peine (2004): Geophysikalische Messungen an den Bohrungen 2113, 2122 und 2123 – unveröffentlicht –

Y

Ye, R.W., B.A. Averill & J.M. Tiedje (1994): Denitrification: Production and consumption of nitric oxide, minireview, Applied and environmental microbiology, Vol. 6, No. 4, 1053-1058.

Z

Zheng, C., 1990, MT3D, A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems, Report to the Kerr Environmental Research Laboratory, US Environmental Protection Agency.

Zheng, C. & P.P. Wang (1999): MT3DMS: A modular three-dimensional multispecies model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; Documentation and User’s Guide, Contract Report SERDP-99-1, U.S. Army Engineer Research and Development Center, Vicksburg, MS.

Zheng, C., & G.D. Bennett (2002): Applied Contaminant Transport Modeling, Second Edition, John Wiley & Sons, New York, 621 pp.

Zumft, W. G. (1997): Cell Biology and Molecular Basis of Denitrifikation, Micobiology and Molecular Biology Reviews, Vol. 61, No. 4, p. 533-616

Verzeichnis der Tabellen

Verzeichnis der Abbildungen

Verzeichnis der Anlagen

Anlage 1: Charakteristik der Untersuchungsgebiete

Anlage 2

Anlage 2, Teil I: Gesteinsuntersuchungen

Anlage 2, Teil II: Laborversuche

Anlage 3: Untersuchungen im Feld

Anlage 4: Daten für den Vergleich der 3 Aquifere

Anlage 5: Regionalisierung und Modellierung

Anlage 6: Übersicht zu den Bohrungen und den dazugehörigen Feld- und Laboruntersuchungen

Anlage 7: Messwerte der Batchversuche

Methoden zur Bestimmung des Umsatzes von Stickstoff, dargestellt für drei pleistozäne Grundwasserleiter Norddeutschlands

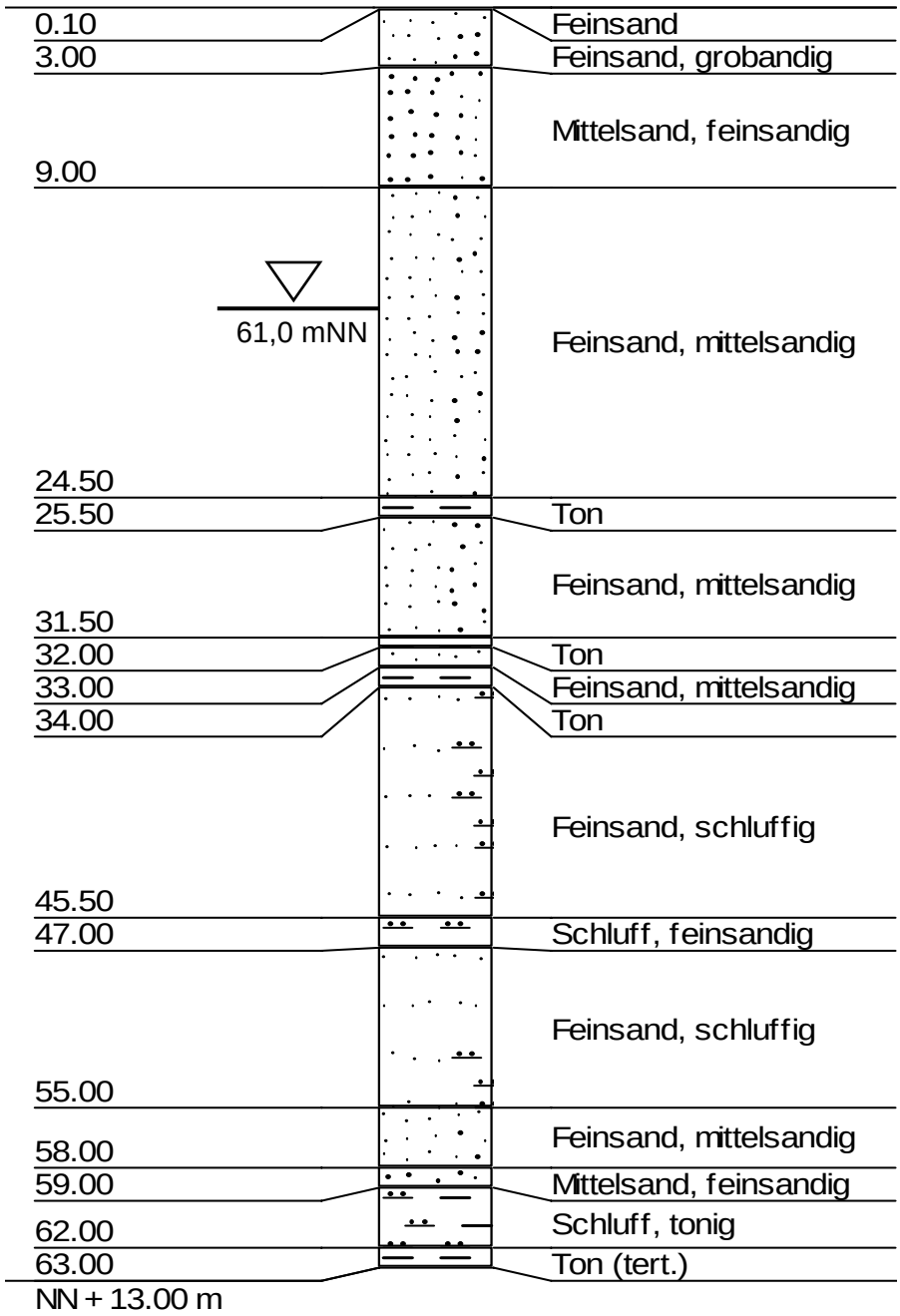
Anlagen

Christian Konrad

Dresden, 30. November 2006

Anlage 1: Charakteristik der Untersuchungsgebiete

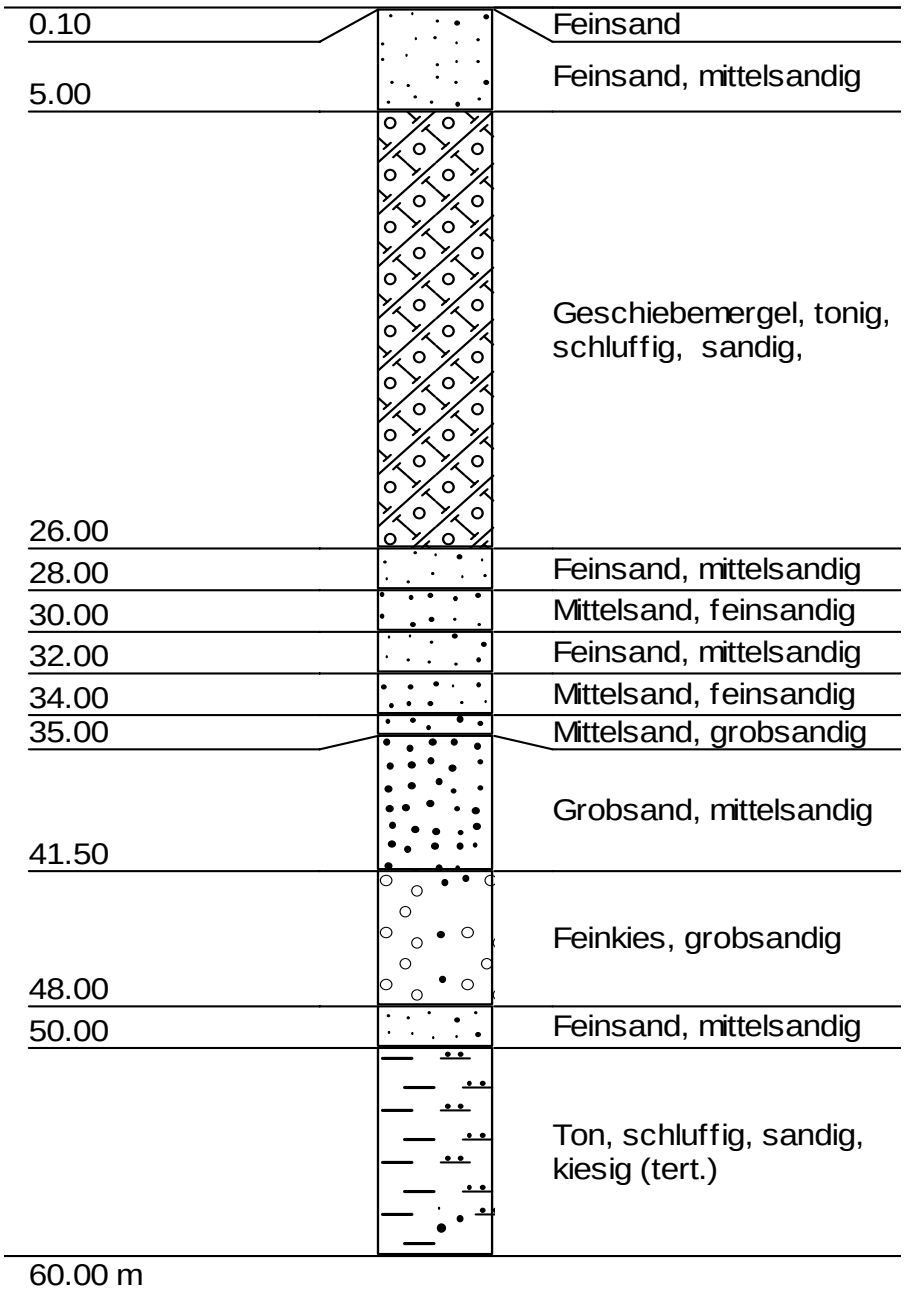
Bezeichnung: Spülbohrung 2123	Bohrdatum: 02.03.04
Projekt: Spülbohrungen Wehnsen	Bearbeiter: Rogge&Co.-Hydrogeologie- GmbH; geändert durch Konrad



Bohransatzpunkt:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 72,00 mNN	▽	Lage des Grundwasserspiegels am 02.03.04
Rechtswert: 3586491		
Hochwert: 5810156		

Abbildung A1-1: Darstellung des Profils von Spülbohrung 2123 nach DIN 4023

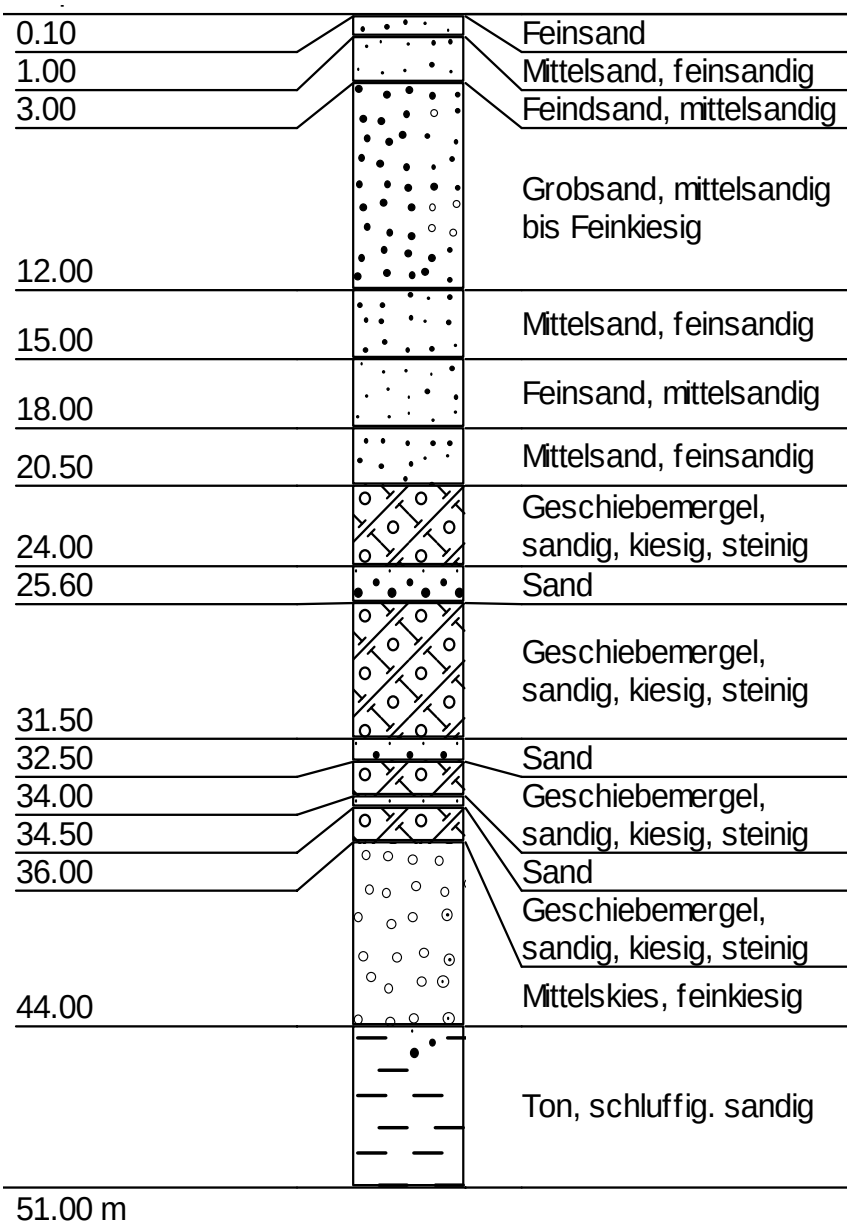
Bezeichnung: Spülbohrung 2122	Bohrdatum: 27.02.04
Projekt: Spülbohrungen Wehnsen	Bearbeiter: Rogge&Co.-Hydrogeologie- GmbH; geändert durch Konrad



Bohransatzpunkt:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 63,50 mNN	▽	Lage des Grundwasserspiegels
Rechtswert: 3584927		nicht bestimmt
Hochwert: 58109993		

Abbildung A1-2: Darstellung des Profils von Spülbohrung 2122 nach DIN 4023

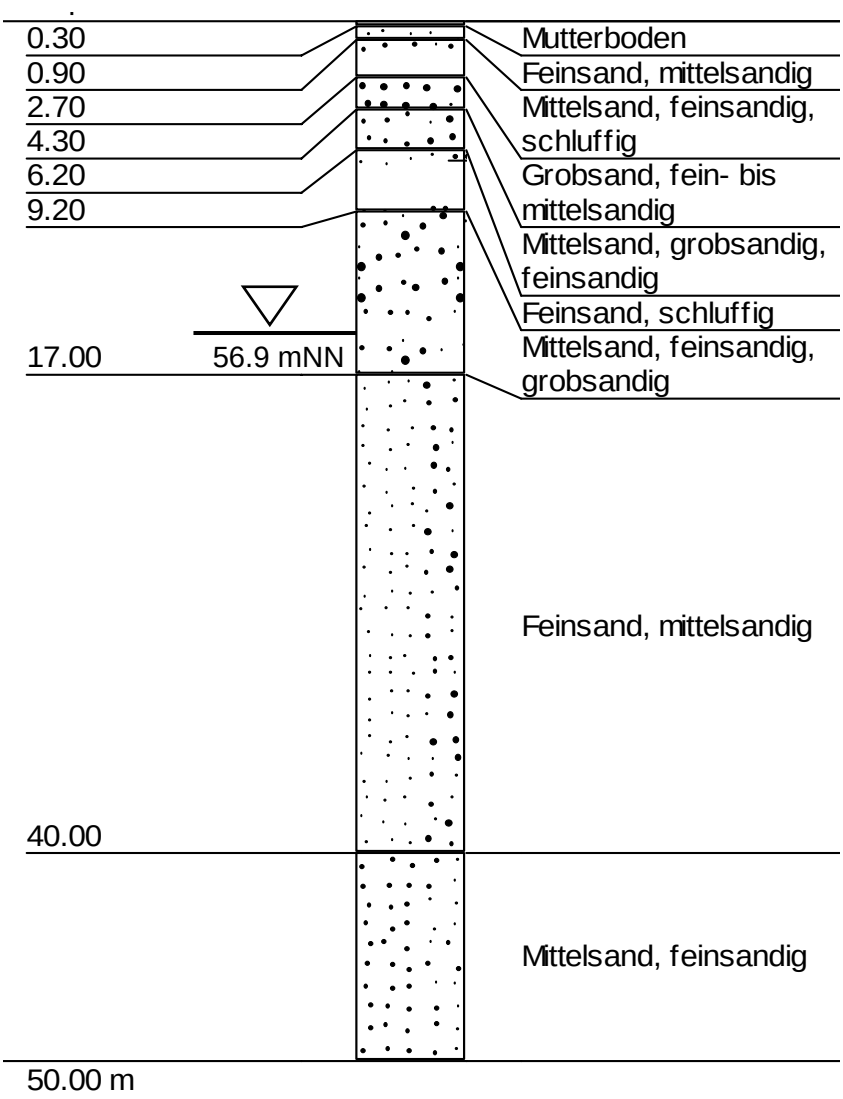
Bezeichnung: Spülbohrung 2113	Bohrdatum: 27.02.04
Projekt: Spülbohrungen Wehnsen	Bearbeiter: Rogge&Co.-Hydrogeologie- GmbH; geändert durch Konrad



Bohransatzpunkt:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 76, 00 mNN	▽	Lage des Grundwasserspiegels
Rechtswert: 3586357		nicht bestimmt
Hochwert: 5808468		

Abbildung A1-3: Darstellung des Profils von Spülbohrung 2113 nach DIN 4023

Bezeichnung: Bohrung 2123 mit Kernentnahme	Bohrdatum: 07.07.04
Projekt: Kernbohrungen Wehnsen	Bearbeiter: Celler Brunnenbau GmbH



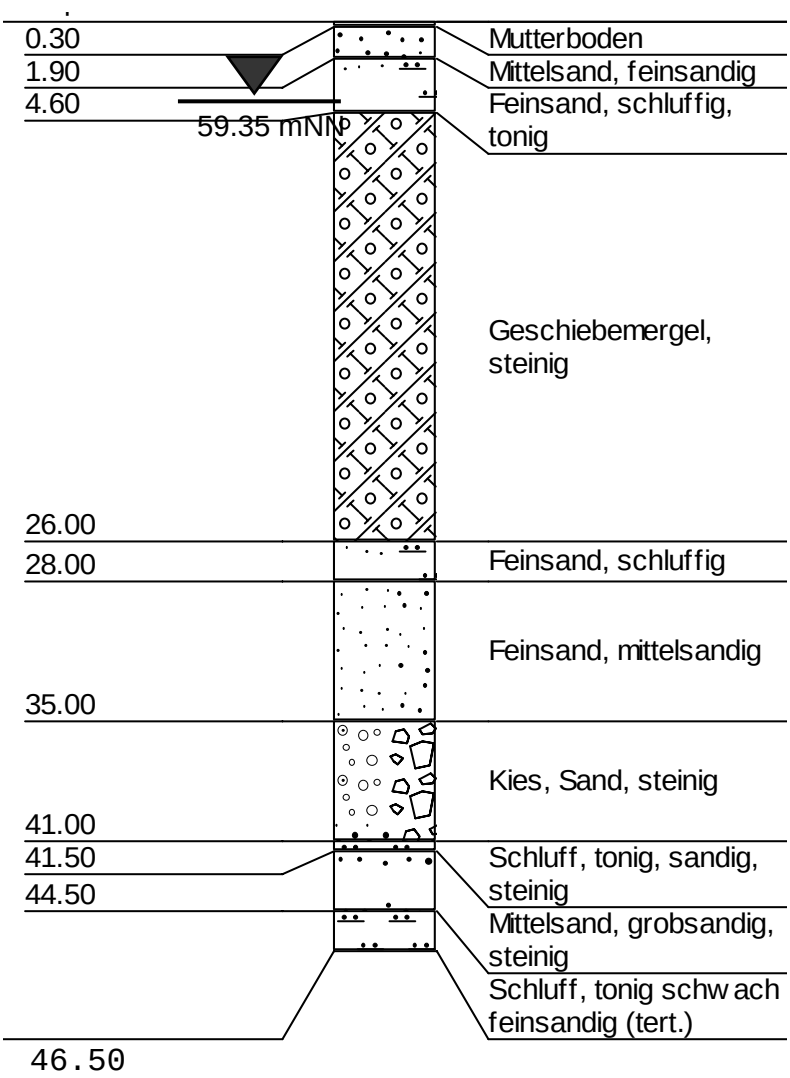
Kernentnahme: von 36 m bis 50 m unter Bohransatzpunkt; 14 Bohrkerne von je 1 m Länge

Bohransatzpunkt:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 72,00 mNN	▽	Lage des Grundwasserspiegels am 07.07.2004
Rechtswert: 3586491		
Hochwert: 5810156	Bohrdurchmesser: 324 mm / 273 mm	

Messstellenausbau: Filterstrecke: 42 bis 44 m u GOK; PVC DN 100

Abbildung A1-4: Darstellung des Profils von Bohrung 2123 mit Kernentnahme nach DIN 4023

Bezeichnung: Bohrung 2122 mit Kernentnahme	Bohrdatum: 14.06.04
Projekt: Kernbohrungen Wehnsen	Bearbeiter: Anlehnung an Celler Brunnenbau GmbH



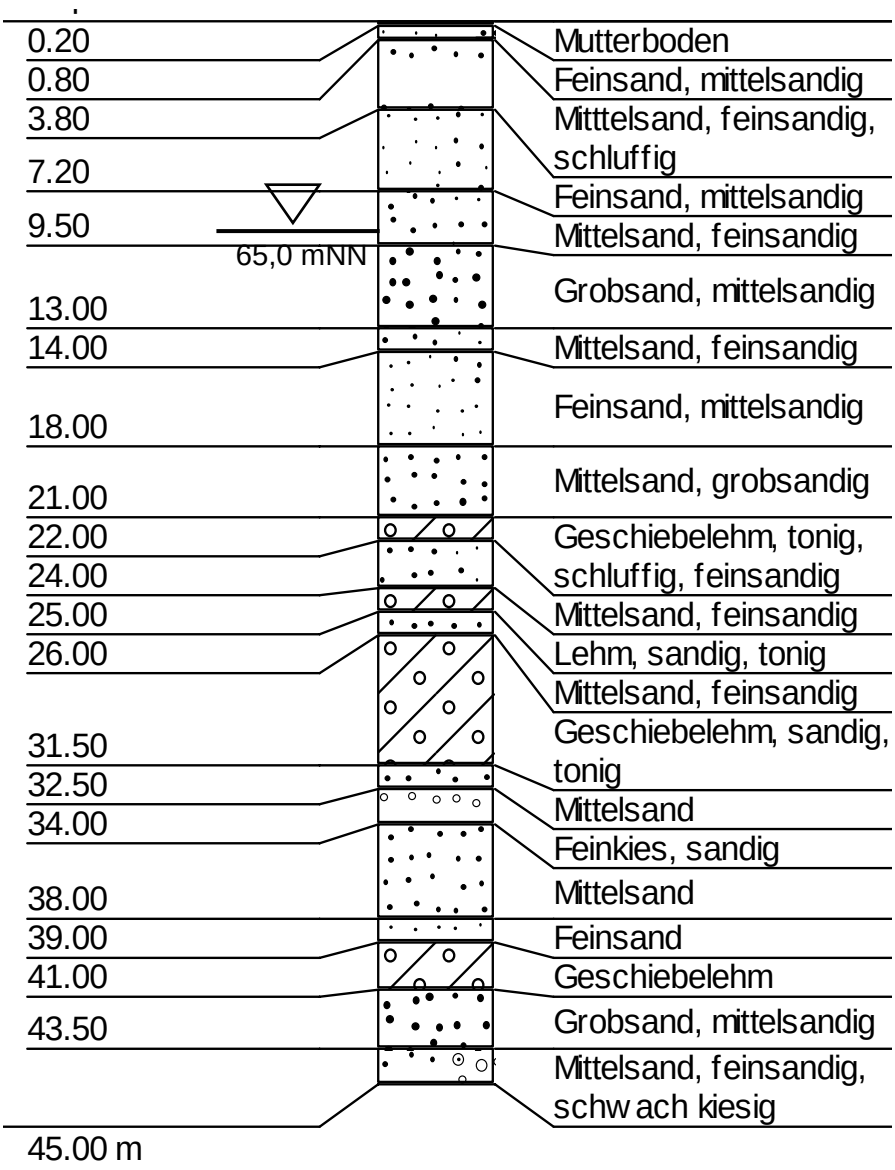
Kernentnahme: von 25 m bis 46 m unter Bohransatzpunkt; 21 Bohrkerne von je 1 m Länge

Bohransatzpunkt:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 63,50 mNN	▼	Lage des Grundwasserspiegels am 14.06.2004
Rechtswert: 3584927		
Hochwert: 58109993	Bohrdurchmesser: 324 mm / 273 mm	

Messstellenausbau: Filterstrecke: 34 bis 36 m u GOK; PVC DN 100

Abbildung A1-5: Darstellung des Profils von Bohrung 2122 mit Kernentnahme nach DIN 4023

Bezeichnung: Bohrung 2113 mit Kernentnahme	Datum: 21.06.04
Projekt: Kernbohrungen Wehnsen	Bearbeiter: Anlehnung an Celler Brunnenbau GmbH



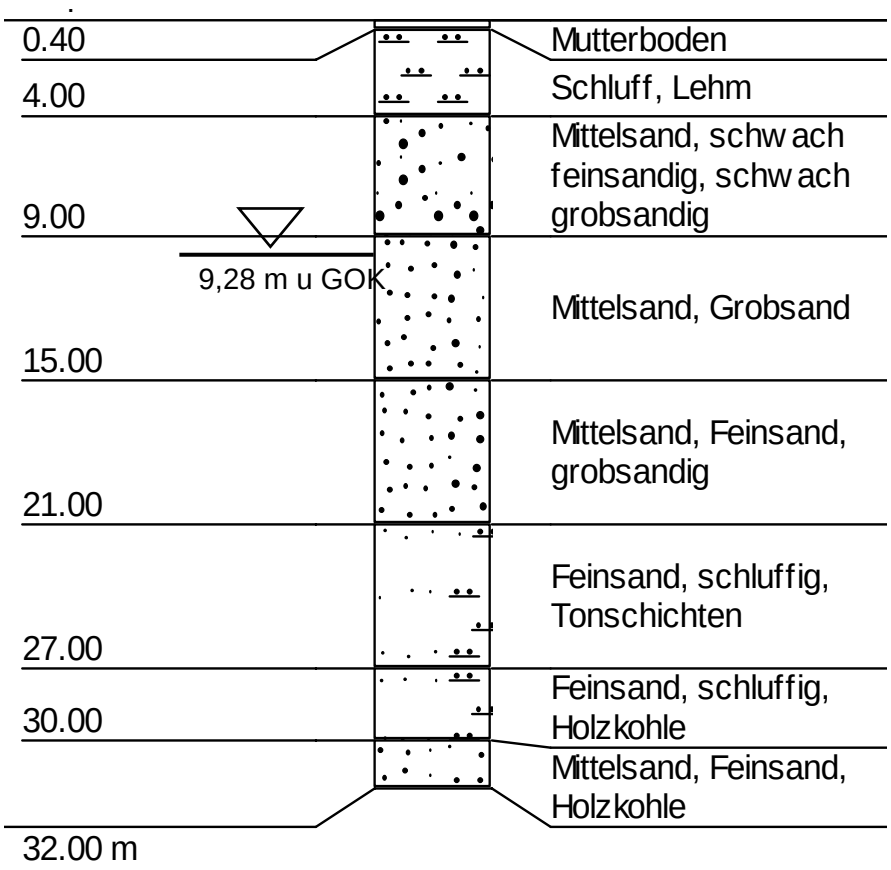
Kernentnahme: von 18 m bis 44 m unter Bohransatzpunkt; 26 Bohrkerne von je 1 m Länge

Bohransatzpunkt:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 76, 00 mNN	▽	Lage des Grundwasserspiegels
Rechtswert: 3586357		Am 21.06.2004
Hochwert: 5808468	Bohrdurchmesser: 324 mm / 273 mm	

Messstellenausbau: Filterstrecke: 42 bis 44 m u GOK; PVC DN 100

Abbildung A1-6: Darstellung des Profils von Bohrung 2113 mit Kernentnahme nach DIN 4023

Bezeichnung: Bohrung 123 mit Kernentnahme	Datum: 08.06.04
Projekt: Kernbohrungen Sulingen	Bearbeiter: Kessing Brunnenbau GmbH; angepasst durch Konrad



Kernentnahme: (jeweils u GOK) 7,5-10,5 m, 12-13 m, 16-17 m, 22,5-23,5 m, 30-31 m

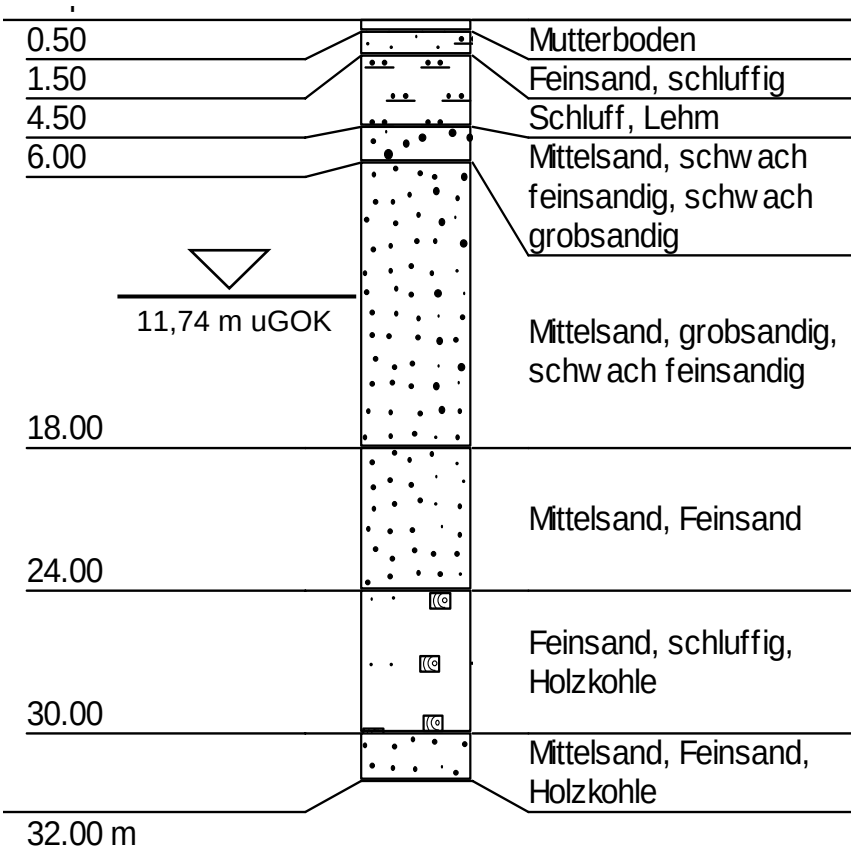
Bohransatzpunkt*:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 57,00 mNN	▽	Lage des Grundwasserspiegels am 08.06.2004
Rechtswert: 348400		
Hochwert: 584700	Bohrdurchmesser: 300 mm	

Messstellenausbau: Filterstrecke: 30 bis 31 m u GOK; PVC DN 80

*Werte aus TK25; Messstelle noch nicht eingemessen

Abbildung A1-7: Darstellung des Profils von Bohrung S123 mit Kernentnahme nach DIN 4023

Bezeichnung: Bohrung 128 mit Kernentnahme	Datum: 10.06.04
Projekt: Kernbohrungen Sulingen	Bearbeiter: Kessing Brunnenbau GmbH



Kernentnahme: (jeweils u GOK) 10-13 m, 14,5-15,5 m, 17-18 m, 22,5-23,5 m, 30-31 m

Bohransatzpunkt*:	Maßstab: 1:500	
Höhe: 60,3 mNN	▽	Lage des Grundwasserspiegels am 10.06.2004
Rechtswert: 348250		
Hochwert: 584250	Bohrdurchmesser: 300 mm	

Messstellenausbau: Filterstrecke: 30 bis 31 m u GOK; PVC DN 80

*Werte aus TK25; Messstelle noch nicht eingemessen

Abbildung A1-8: Darstellung des Profils von Bohrung 128 mit Kernentnahme nach DIN 4023

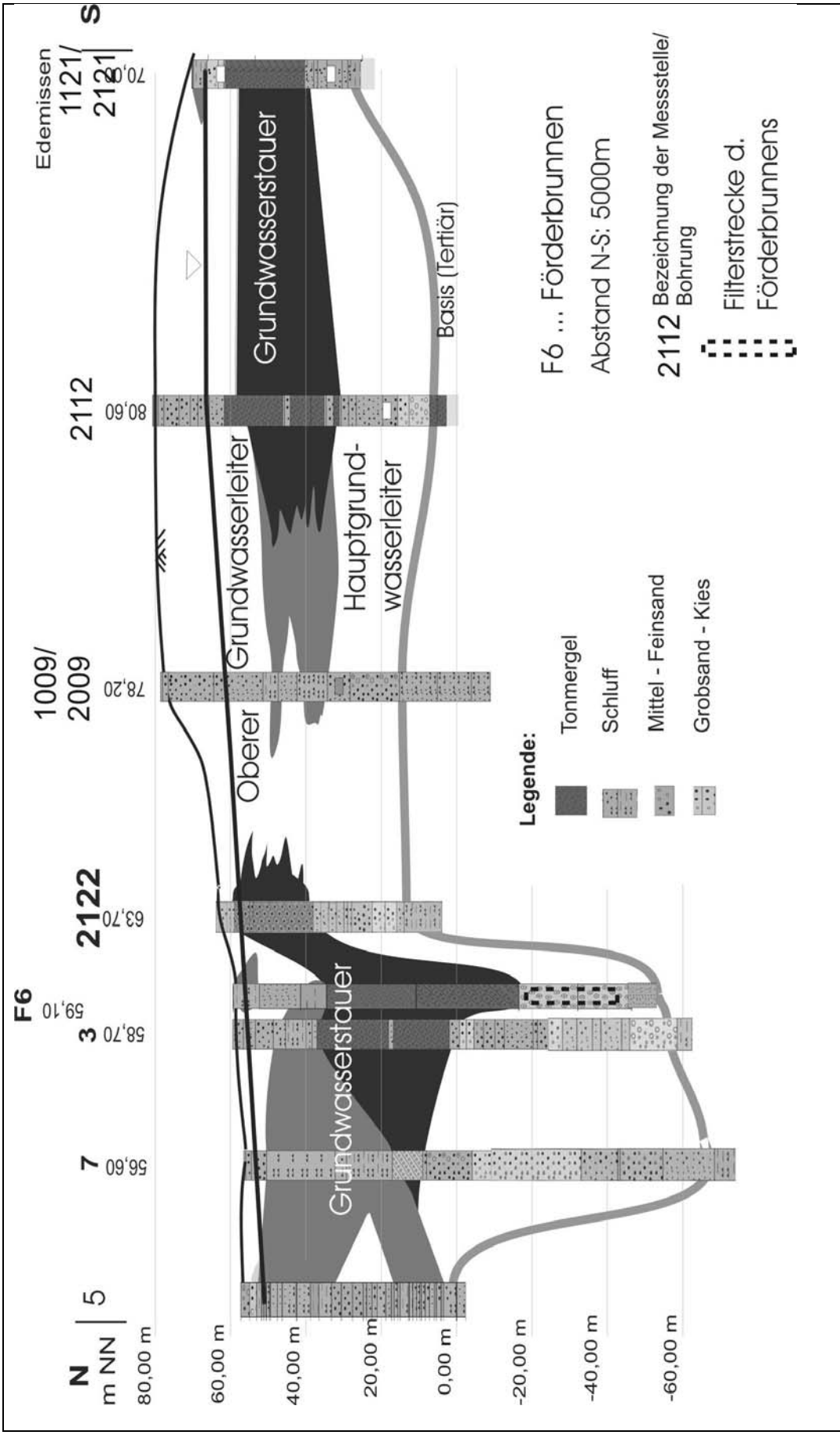


Abbildung A1-9: Geologisches Profil des Untersuchungsgebietes Anstrom Brunnen F6, Wehnsen

.

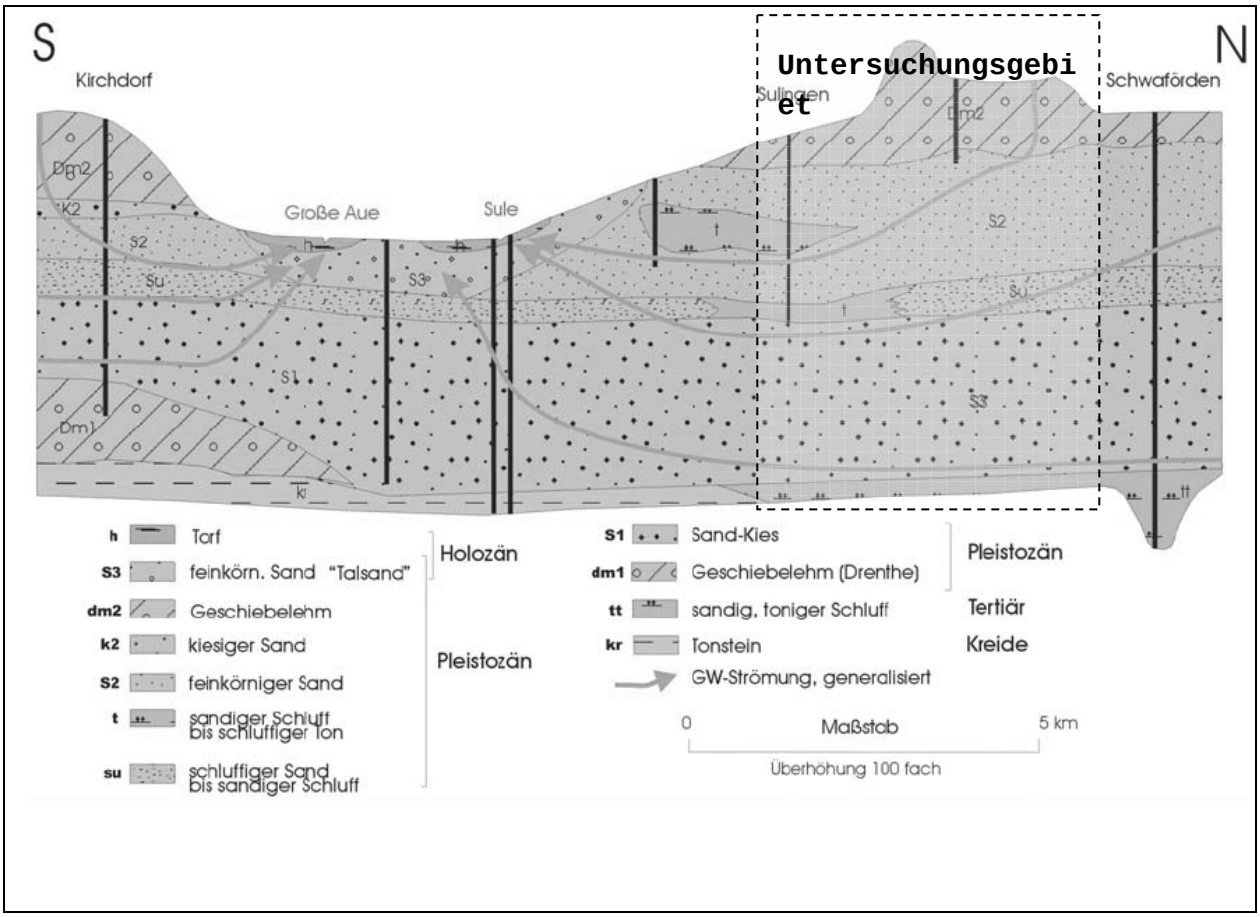


Abbildung A1-10:Geologischer Schnitt des Gebietes Kirchdorf – Schwaförden, nach WV SULINGER LAND (2003)

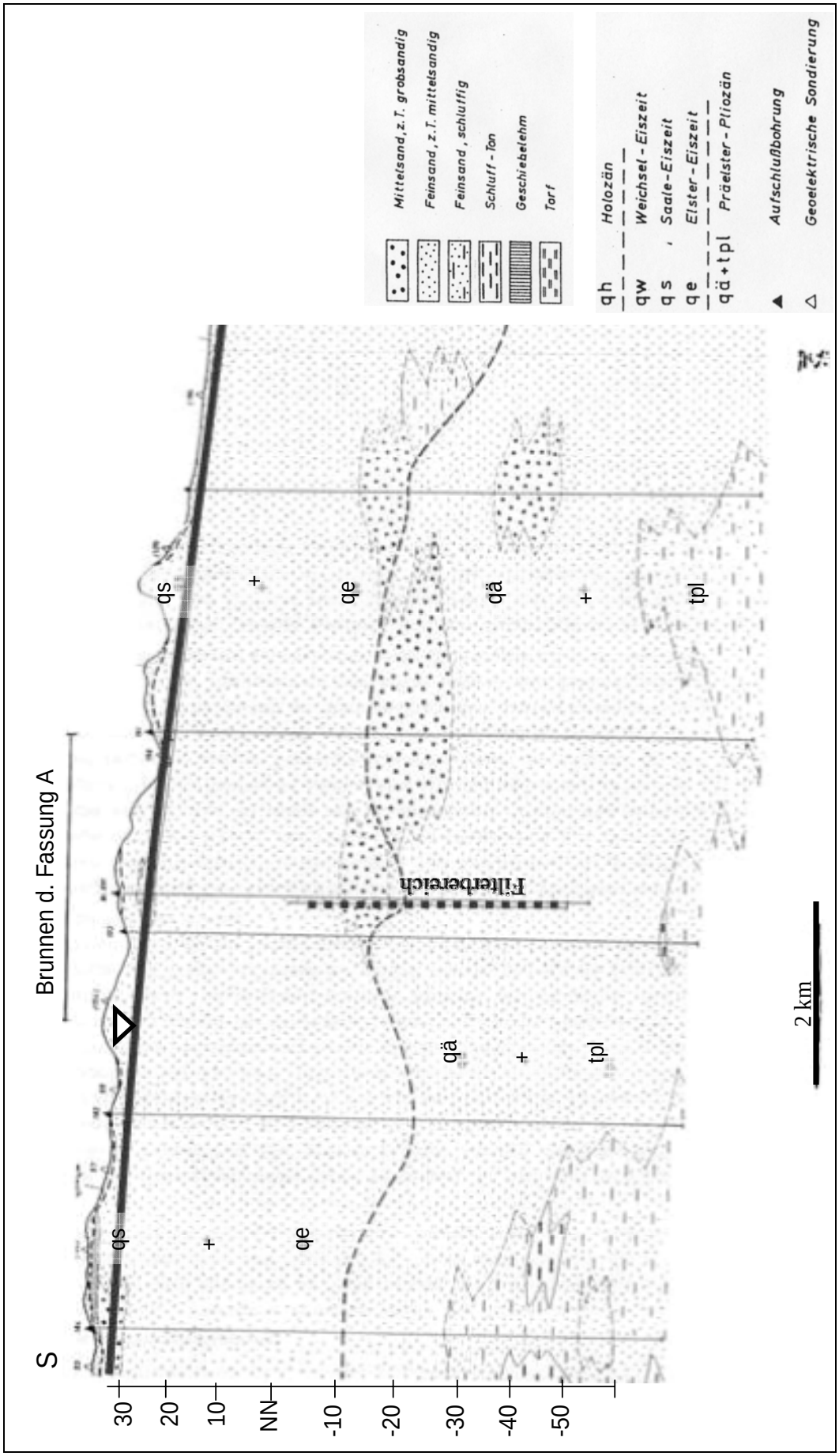


Abbildung A1-11: Geologischer Schnitt durch Fassung A, C und D des Wasserwerkes Thülsfelde, nach JOSOPAIT (1990)

Anlage 2, Teil I

Gesteinsuntersuchungen

2.1 Analysemethoden

2.1.1 Siebanalyse:

Die maschinelle Trockensiebung erfolgte nach DIN 18 123. Der K-Wert wurde nach BEYER (1964) bestimmt.

2.1.2 Schlämmanalyse:

Die Schlämmanalyse wurde nach DIN ISO 11277 im Labor des Institutes für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden durchgeführt.

2.1.3 Glühverlust:

Der Glühverlust wurde gemäß DIN 38 414 Teil 3 im Labor des Institutes für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden bestimmt.

2.1.4 Gehalt des labilen Kohlenstoffs, C_l

Die Bestimmung wurde am Department für Nutzpflanzwissenschaften, Abt. Agrarpedologie der Universität Göttingen durchgeführt. Dabei wurde eine konstante Einwaage von 15 g Sediment vorgenommen. Die $KMnO_4$-Lösung hat eine Konzentration zwischen 40 und 60 mM, 25 ml werden auf jede Probe pipettiert. $KMnO_4$ reagiert zunächst mit dem natürlichen organischen Material und oxidiert es. Die Proben werden für 24 Stunden auf einen Überkopfschüttler geschüttelt. Bei 2000 rpm (rotations per minute) werden diese dann 5 Minuten zentrifugiert. Der Überstand sowie die Standards werden 1:101 verdünnt. Am Photometer der Firma Analytik Jena Specord 40 werden die Proben bei einer Wellenlänge von 525 nm gemessen. Bei der Auswertung der am Photometer gewonnenen Daten muss berücksichtigt werden, dass 1 mM $KMnO_4$ 9mg bzw. 0,75 mM Kohlenstoff oxidiert (= labiler Kohlenstoff). Der nicht-oxidierte Kohlenstoff ist somit der nicht-labile Kohlenstoff. Eine hohe Oxidationsrate entspricht demnach einem hohen organischen oxidierbarem C-Gehalt der Sedimentprobe. Die $KMnO_4$-Methode beruht auf dem Prinzip der Oxidation von C=C-Doppelbindungen, Aldehydgruppen und Hydroxylgruppen organischer Substanz.

2.1.5 Löslicher organischer Kohlenstoff, DOC_l

Die Bestimmung wurde am Department für Nutzpflanzwissenschaften, Abteilung Agrarpedologie der Universität Göttingen durchgeführt. Entsprechend MEHRANFAR (2003) werden 20g frische Sedimentprobe eingewogen und in 25 ml 0.02N $CaCl_2$ 1 Stunde geschüttelt. Die Proben werden gefiltert und anschließend mit 0.01N HCl angesäuert, um den anorganischen C-Gehalt in Form von CO_2 zu entfernen. Die Proben werden am C-Analysator der Firma Maihak TOCOR2 gemessen.

2.1.6 Heißwasserlöslicher Kohlenstoff, C_{HWL}

Hot Water Extraction, nach BEHM (1988) und CHODAK et al. (2003):

Die Bestimmung wurde am Department für Nutzpflanzwissenschaften, Abteilung Agrarpedologie der Universität Göttingen durchgeführt. 10g frisches Probenmaterial werden mit 50ml destilliertem Wasser vermengt und bei 110°C für 1 Stunde gekocht. Nach dem Abkühlen wird auf jede Probe 100 µl 5N $CaCl_2$ pipettiert. Nach dem Filtern der Proben erfolgt die Messung am C-Analysator der Firma Maihak TOCOR2.

2.1.7 Gehaltes an Gesamtschwefel

Der Gesamtschwefelgehalt wurde durch Verbrennung mit O_2 bei 1350°C im Eltra High CS 500 Kohlenstoff & Schwefel-Analysator am Institut für Wasserchemie der TU Dresden bestimmt. Zuvor wurden die Proben 2 Tage bei 40°C getrocknet, in einer Kugelmühle gemahlen und auf < 0,125 mm gesiebt. Zuverlässig auswertbar waren die Ergebnisse im Messbereich zwischen 15 und 4000 µg S.

2.1.8 Bestimmung der S-Spezies

Die Bestimmung der S-Spezies erfolgte am Institut für Geowissenschaften der TU Braunschweig an ungestörten Proben aus der Kernbohrung. Elution von Sulfat entsprechend S4 (DIN) an einem homogenisierten Probenaliquot. Mit wenigen Ausnahmen kann Sulfatschwefel als wasserlöslich betrachtet werden (Gips, Anhydrit). In Modifikation von S4 muss die Mindest-Lösungsmenge auf das Aktivitätsprodukt des Sulfates ausgerichtet werden (Abschätzung über Gesamt-Schwefel): Zur Vermeidung der Oxidation von Sulfidschwefel muss die Elution unter Sauerstoffabschluss erfolgen; im Argon-gespülten Handschuhkasten.
An einem weiteren, homogenen, Probenaliquot erfolgt die Bestimmung des Gesamtschwefels (ICP-OES nach DIN). Die Differenz aus Gesamt-S und eluierbarem S wird als Sulfid-S (bzw. reduzierter Schwefel) betrachtet.

2.1.9 Gehalt an organischem Kohlenstoff (TOC)

Die Bestimmung erfolgte nach DIN ISO 10694 am Institut für Wasserchemie der TU Dresden.

2.1.10 Gehalt an gelöstem organischem Kohlenstoff (DOC)

Die Bestimmung des Gehaltes an gelöstem organischen Kohlenstoff in einer Wasserprobe erfolgte am Institut für Siedlungs- und Industriewasserwirtschaft der TU Dresden.

2.2 Ergebnisse der Gesteinsuntersuchungen

2.2.1 Analysen am Bohrgut der Spülbohrungen in Wehnsen

Tabelle A2-1.: Feinkornanteil und K-Wert (Beyer), Spülbohrungen Wehnsen

Bohrung	2123		2122		2113	
Parameter / Teufe	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm
[m u GOK]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]
0-1		3	1,01 E-04	9	1,89 E-04	3
1-2		2	8,67 E-05	7	2,77 E-04	2
2-3	3,75 E-04	2	1,15 E-04	5	3,54 E-04	2
3-4	8,03 E-04	1	5,93 E-05	8	7,17 E-04	0,5
4-5	6,64 E-04	1		12	6,73 E-04	0,1
5-6	7,04 E-04	1	4,27 E-05	8	6,52 E-04	0,1
6-7	5,81 E-04	1		11	5,19 E-04	0,1
7-8	6,36 E-04	1	4,94 E-05	6	8,08 E-04	0,1
8-9	5,15 E-04	1	4,94 E-05	7	5,33 E-04	0,1
9-10	5,93 E-04	1	5,94 E-05	6	6,41 E-04	0,1
10-11	6,38 E-04	1	5,36 E-05	7	6,22 E-04	0,5
11-12	6,42 E-04	0,5	6,22 E-05	6	6,57 E-04	0,1
12-13	5,69 E-04	0,5	5,91 E-05	9,5	4,93 E-04	0,1
13-14	6,01 E-04	0,5	5,91 E-05	6	5,47 E-04	0,1
14-15	5,34 E-04	0,5	4,14 E-05	8,5	4,79 E-04	0,1
15-16	5,79 E-04	0,5	7,85 E-05	4	4,55 E-04	0,1
16-17	4,94 E-04	0,5	5,40 E-05	7	2,83 E-04	0,1
17-18	5,26 E-04	0,5	4,25 E-05	8	2,95 E-04	0,1
18-19	5,74 E-04	0,5	3,55 E-05	9	4,14 E-04	0,1
19-20	5,18 E-04	0,5	5,91 E-05	5	4,74 E-04	0,1
20-21	4,60 E-04	0,5	4,73 E-05	8	4,51 E-04	0,1
21-22	4,94 E-04	0,5	6,10 E-05	6	4,46 E-04	1
22-23	2,77 E-04	0,5	6,75 E-05	6	1,07 E-04	6
23-24	4,37 E-04	0,1	9,01 E-05	5	2,32 E-04	3
24-25	1,15 E-04	0,1	9,32 E-05	5	1,25 E-04	3
25-26	3,51 E-04	0,1	1,01 E-04	4	2,14 E-04	2
26-27	1,47 E-04	1	6,54 E-05	6	1,55 E-04	3
27-28	2,04 E-04	1	7,19 E-05	4	9,26 E-05	5
28-29	1,92 E-04	1	4,65 E-05	5		13
29-30	1,81 E-04	1	1,44 E-04	2	2,25 E-04	4
30-31	1,46 E-04	1	1,18 E-04	3	2,32 E-04	4
31-32	1,56 E-04	1	1,18 E-04	3	4,64 E-04	3
32-33	1,52 E-04	1	1,23 E-04	2,5	2,37 E-04	3
33-34	1,33 E-04	2	1,41 E-04	2	9,27 E-04	1,5
34-35	1,27 E-04	3	4,10 E-04	1,5	3,08 E-04	2
35-36	1,35 E-04	2	7,89 E-04	0,5	9,30 E-04	1,5
36-37	1,16 E-04	4	3,64 E-04	0,5	7,70 E-04	3
37-38	1,16 E-04	4	1,78 E-03	0,5	2,32 E-03	2
38-39	1,14 E-04	5	8,71 E-04	0,5	1,56 E-03	2
39-40	1,14 E-04	3	1,76 E-03	0,5	5,54 E-04	3
40-41	1,15 E-04	3	3,62 E-03	0,5	4,11 E-04	3
41-42	1,13 E-04	5	2,69 E-03	0,5	6,41 E-04	2
42-43	1,08 E-04	4	1,10 E-03	3	1,52 E-03	1
43-44	1,10 E-04	4	1,97 E-03	0,5	9,24 E-04	1
44-45	1,10 E-04	5	9,64 E-04	2	5,19 E-04	1,5
45-46	1,12 E-04	4	1,93 E-03	0,5	3,33 E-04	2
46-47	1,01 E-04	4	1,58 E-03	0,5	9,75 E-05	5

Tabelle A2-1.: Feinkornanteil und K-Wert (Beyer), Spülbohrungen Wehnsen – Fortsetzung –

Bohrung	2123		2122		2113	
Parameter / Teufe	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm
[m u GOK]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]
47-48	1,15 E-04	3	1,76 E-03	0.1	1,05 E-05	4
48-49	1,17 E-04	2	2,39 E-04	1	1,15 E-04	5
49-50	1,35 E-04	2	7,80 E-04	2	1,11 E-04	4
50-51	1,25 E-04	2	2,08 E-04	2	1,29 E-04	5
51-52	1,34 E-04	1	1,78 E-03	2		
52-53	1,39 E-04	1	1,49 E-04	3		
53-54	1,47 E-04	2	6,39 E-04	3		
54-55	1,49 E-04	2		4		
55-56	2,18 E-04	1		4		
56-57	2,33 E-04	1		6		
57-58	3,19 E-04			4		

Tabelle A2-2.: S_{gesamt}, Spülbohrungen Wehnsen

Bohrung / Teufe	2123	2122	2113
[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]
21-22		2102	28
22-23		1847	
23-24			
24-25			
25-26			
26-27			
27-28			2095
28-29			3247
29-30			1765
30-31		906	748
31-32		902	997
32-33		554	
33-34		741	
34-35		1294	
35-36			
36-37	453		
37-38	595		
38-39	487		
39-40	530		
40-41	662		
41-42	519		

Tabelle A2-3a: DOC_l, C_{HWL} und C_l, TOC und Glühverlust der Spülbohrung 2123 Wehnsen

Parameter / Teufe	C_l	C_{HWL}	DOC_l	TOC	Glüh-verlust
[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
0-1	120,7	6,2	14,0	629,5	1,7
1-2	245,0	84,5	27,3	1184	1,1
2-3				913	1,0
3-4				830	0,9
4-5	213,7	61,2	13,3	865,1	0,9
5-6				947,1	0,8
6-7				429,2	0,7
7-8	155,3	47,6	8,2	421,4	0,7
8-9				461,2	0,7
9-10				643,1	0,6
10-11	81,3	48,9	23,1	479,8	0,5
11-12				342,6	0,5
12-13				320,2	0,6
13-14	145,2	56,4	16,9	293,4	0,4
14-15				326	0,4
15-16				190,35	0,3
16-17	139,6	83,9	10,8	154,75	0,3
17-18				171	0,2
18-19				519,6	0,3
19-20				590,9	0,4
20-21	74,6	39,6	31,8	303,75	0,4
21-22				394,85	0,4
22-23				253,05	0,3
23-24	140,1	52,0	11,6	244,65	0,3
24-25				182,15	0,4
25-26				218	0,4
26-27	155,2	64,8	11,0	342	0,4
27-28				422,4	0,4
28-29				393,25	0,4
29-30				367,65	0,4
30-31	120,8	51,0	26,5	289	0,4
31-32				252,7	0,4
32-33				366	0,5
33-34	286,6	72,0	53,1	800,85	0,5
34-35				716,55	0,5
35-36				710,7	0,5
36-37	323,9	68,3	39,7	1054,5	0,6
37-38				1325,5	0,7
38-39				1127,5	0,6
39-40	435,1	65,2	27,6	1067,5	0,6
40-41				1301	0,6
41-42				1547	0,7
42-43	1428,2	88,0	53,8	3953,66	1,1
43-44				2861,5	1,0
44-45				2959	1,0
45-46	1332,0	100,9	64,3	2672,5	0,9
46-47				2347,33	0,8
47-48				1690	0,7
48-49				1048	0,5
49-50	370,7	66,6	43,0	1036	0,4
50-51				984,8	0,4
51-52				795,35	0,4
52-53	323,5	64,4	37,2	702,35	0,4
53-54				770,1	0,4

Tabelle A2-3a: DOC_l, C_{HWL} und C_l, TOC und Glühverlust der Spülbohrung 2123 Wehnsen – Fortsetzung –

Parameter / Teufe	C_l	C_{HWL}	DOC_l	TOC	Glüh-verlust
[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
54-55				510,35	0,3
55-56	283,8	61,1	36,6	554,25	0,3
56-57				780,7	0,4
57-58				862,1	0,3

Tabelle A2-3b: DOC_l, C_{HWL} und C_l, TOC und Glühverlust der Spülbohrung 2122 Wehnsen

Parameter / Teufe	C_l	C_{HWL}	DOC_l	TOC	Glüh-verlust
[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
0-1	75,0	16,5	18,7	681,6	0,8
1-2	201,3	98,1	38,2	1364,0	0,9
2-3				784,0	0,6
3-4				995,3	1,1
4-5	181,8	70,0	11,5	804,9	1,3
5-6				1802,0	1,7
6-7				3874,5	2,0
7-8	1469,9	57,4	15,1	4509,0	1,9
8-9				4344,0	1,3
9-10				2886,0	1,3
10-11	1049,6	88,6	15,5	2650,5	1,3
11-12				3786,0	1,5
12-13	710,5	47,5	34,4	4067,0	1,6
13-14	746,2	86,1	13,0	3804,0	2,3
14-15				3954,0	2,0
15-16				3276,0	1,5
16-17	1356,6	110,5	20,0	359,0	1,3
17-18				4914,0	2,6
18-19				5006,0	2,1
19-20	999,4	36,3	17,7	3792,0	1,6
20-21				3293,0	1,2
21-22				2673,3	1,2
22-23	455,0	78,6	11,1	1932,0	0,9
23-24				2822,3	0,8
24-25				1966,5	0,7
25-26	515,0	72,5	10,3	1894,0	0,8
26-27				2777,5	0,7
27-28				1863,5	0,7
28-29	441,0	62,1	11,3	1149,0	0,6
29-30				1609,5	0,5
30-31	333,8	29,7	25,5	1199,0	0,7
31-32				984,0	0,5
32-33				660,4	0,4
33-34	313,5	48,2	7,2	2749,7	0,8
34-35				740,8	0,6
35-36				887,7	0,8
36-37				703,8	0,5
37-38	160,2	27,5	5,5	485,0	0,5
38-39				379,9	0,5
39-40				412,5	0,5
40-41				372,3	0,4

Tabelle A2-3b: DOC_I, C_{HWL} und C_I, TOC und Glühverlust der Spülbohrung 2122 Wehnsen – Fortsetzung –

Parameter / Teufe	C_I	C_{HWL}	DOC_I	TOC	Glüh-verlust
[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
41-42	190,5	23,6	19,7	787,0	0,4
42-43				415,1	0,6
43-44	149,0	25,5	8,2	514,7	0,5
44-45				765,5	0,5
45-46				396,8	0,5
46-47	117,0	43,6	3,8	367,9	0,4
47-48				524,4	0,5
48-49				639,7	0,5
49-50	217,8	99,7	7,8	1023,2	0,6
50-51				808,4	0,8
51-52	161,0	32,8	21,9	1307,0	0,8
52-53				713,2	0,8
53-54				555,9	0,9
54-55	226,8	97,6	9,4	751,7	0,7
55-56				753,4	0,8
56-57		54,1	9,2	912,0	1,1
57-58	252,0			663,7	0,8

Tabelle A2-3c: DOC_I, C_{HWL} und C_I, TOC und Glühverlust der Spülbohrung 2113 Wehnsen

Parameter / Teufe	C_I	C_{HWL}	DOC_I	TOC	Glüh-verlust
[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
0-1		19,0	17,1	934,2	1,5
1-2	145,6	55,7	27,6	1672	1,3
2-3	266,6			979	1,0
3-4				488,2	0,8
4-5	125,4	27,4	53,1	359	0,6
5-6				305,6	0,5
6-7				335,5	0,4
7-8	134,9	32,2	43,8	273,3	0,4
8-9				231,9	0,5
9-10				242	0,4
10-11	73,7	15,3	18,5	162,25	0,4
11-12				167,6	0,4
12-13				166,05	0,4
13-14				182,6	0,3
14-15	108,1	13,9	36,4	211,05	0,3
15-16				202,1	0,4
16-17				185,2	0,3
17-18	128,7	69,7	28,8	151,65	0,3
18-19				152,8	0,3
19-20				209,2	0,3
20-21	82,6	12,0	27,4	305,5	0,3
21-22				166,3	0,8
22-23				1843,5	1,5
23-24	552,1	74,2	29,4	241,5	1,5
24-25				887,5	0,7
25-26				1785,5	0,8
26-27	584,1	141,2	49,5	1876	0,9
27-28				8000	2,1

Tabelle A2-3c: DOC_l, C_{HWL} und C_l, TOC und Glühverlust der Spülbohrung 2113 Wehnsen

– Fortsetzung –

Parameter / Teufe	C_l	C_{HWL}	DOC_l	TOC	Glüh-verlust
[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
28-29				8000	2,5
29-30	715,2	69,1	48,3	6199,7	2,0
30-31				2632,5	1,2
31-32				2581	1,2
32-33	1263,6	16,4	23,8	1976	0,9
33-34				2365,5	1,0
34-35				2014,3	1,5
35-36	472,8	68,1	18,8	1990	1,0
36-37				2000	1,1
37-38				1873	1,1
38-39	378,0	58,0	34,9	1301,5	1,1
39-40				1028	1,1
40-41				1505,5	1,1
41-42	1448,5	67,3	9,0	1092,5	1,1
42-43				1091	1,0
43-44	253,7	34,0	33,3	1005,5	1,0
44-45				1179	1,1
45-46				1310	1,8
46-47	363,6	59,7	11,9	1504	1,9
47-48				1650	2,9
48-49	360,2	52,1	5,8	1171	1,5
49-50				1467	1,4
50-51	351,5	27,2	20,5	1428	1,4

2.2.2 Analysen am Bohrgut der Kernbohrungen in Wehnsen

Tabelle A2-4.: Feinkornanteil und K-Wert (Beyer), Kernbohrungen Wehnsen

Bohrung	2123		2122		2113	
Parameter / Teufe	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm
[m u GOK]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]
18-19					4,31 E-04	0,1
19-20					1,36 E-04	0,5
20-21					2,18 E-04	0,5
21-22					1,00 E-07	44
22-23					7,66 E-05	5
23-24					4,71 E-05	8
24-25					4,60 E-08	36
25-26			4,20 E-07	64	1,70 E-06	14
26-27			4,21 E-05	8	1,57 E-04	3
27-28			2,20 E-05	12		72

Tabelle A2-4.: Feinkornanteil und K-Wert (Beyer), Kernbohrungen Wehnsen – Fortsetzung -

Bohrung	2123		2122		2113	
Para-meter / Teufe	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm	K-Beyer	d< 0,065mm
[m u GOK]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]
28-29			9,95 E-05	2	2,90 E-07	32
29-30			2,03 E-04	0.1	2,90 E-07	37
30-31			4,20 E-06	30	7,40 E-07	33
31-32			1,14 E-04	1	9,80 E-07	31
32-33			9,91 E-05	3	4,78 E-04	0.5
33-34			1,23 E-04	0.1	1,00 E-03	0.1
34-35			1,25 E-04	0.5	5,28 E-04	1
35-36			9,40 E-04	0.1	3,18 E-05	10
36-37	7,34 E-05	2	1,45 E-03	0.1	7,40 E-07	15
37-38	1,25 E-04	0,1	1,43 E-03	0.5	1,00 E-07	12
38-39	1,19 E-04	0,1	5,44 E-04	0.5	5,49 E-05	5
39-40	6,74 E-05	4	5,40 E-03	2	4,60 E-08	28
40-41	2,60 E-06	16	1,00 E-02	0	2,60 E-06	29
41-42	6,58 E-05	2	6,02 E-04	0.1	1,20 E-05	12
42-43	6,22 E-05	4	1,16 E-03	0.1	1,11 E-04	2
43-44	8,82 E-05	1,5	Kernverlust		5,74 E-05	5
44-45	1,10 E-04	1	4,91 E-05	5	4,43 E-05	8
45-46	5,79 E-05	4	3,88 E-05	10		
46-47	1,19 E-04	0,1				
47-48	9,39 E-05	2				
48-49	1,56 E-04	0,5				
49-50	1,38 E-04	0,5				

Tabelle A2-5a: Schwefelspezies und Glühverlust für die Kernbohrung 2123 Wehnsen

Teufe	Bezeichnung der Probe	Sulfat-S	Sulfid - S	Gesamt- S	Glüh-verlust
[m u GOK]		[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
35-36	W13	290	3260	3550	0,7
36-37		350	1130	1480	1,2
37-38		180	1490	1680	0,2
38-39		80	1190	1280	0,5
39-40		60	860	920	0,4
40-41	W14	150	440	590	0,8
41-42	W15	280	900	1170	1,1
42-43	W3	140	1560	1700	1,3
43-44	W4	50	890	940	0,6

Tabelle A2-5a: Schwefelspezies und Glühverlust für die Kernbohrung 2123 Wehnsen - Fortsetzung -

Teufe [m u GOK]	Bezeichnung der Probe	Sulfat-S [mg·kg^{-1}]	Sulfid - S [mg·kg^{-1}]	Gesamt- S [mg·kg^{-1}]	Glüh-verlust [%]
44-45	W16	140	1180	1320	0,6
45-46	W17	180	2060	2240	0,6
46-47		200	1340	1530	0,3
47-48		100	1430	1530	0,6
48-49		70	550	620	0,3
49-50	W18	80	740	820	0,3

Tabelle A2-5b: Schwefelspezies und Glühverlust für die Kernbohrung 2122 Wehnsen

Teufe [m u GOK]	Bezeichnung der Probe	Sulfat-S [mg·kg^{-1}]	Sulfid - S [mg·kg^{-1}]	Gesamt- S [mg·kg^{-1}]	Glüh-verlust [%]
27-28	W9	530	2100	2630	2,7
28-29		60	830	890	0,4
29-30		40	970	1010	0,4
30-31		290	3310	3600	0,4
31-32	W10	180	930	1110	0,4
32-33		90	1330	1420	2,2
33-34	W1	40	1190	1230	0,6
34-35	W2	60	2040	2090	0,9
35-36		130	1330	1460	0,7
36-37		60	160	230	1,1
37-38		20	60	90	1,4
38-39	W11	50	70	130	0,8
39-40		20	100	120	0,6
40-41					1,1
41-42		10	70	90	
42-43		40	290	330	0,6
43-44		10	100	100	
44-45	W12				
45-46		20	50	70	0,7

Tabelle A2-5c: Schwefelspezies und Glühverlust für die Kernbohrung 2113 Wehnsen

Teufe [m u GOK]	Bezeichnung der Probe	Sulfat-S [mg·kg^{-1}]	Sulfid - S [mg·kg^{-1}]	Gesamt- S [mg·kg^{-1}]	Glühverlust [%]
18-19	W5	10	50	60	0,4
19-20	W6	10	30	40	0,3
20-21		10	90	110	0,3
21-22	W19	180	1870	2040	3,1
22-23		30	90	120	1,3
23-24		60	200	260	0,3
24-25		100	380	480	0,4
25-26	W22	30	180	220	0,3

Tabelle A2-5c: Schwefelspezies und Glühverlust für die Kernbohrung 2113 Wehnsen –Fortsetzung-

Teufe	Bezeichnung der Probe	Sulfat-S	Sulfid - S	Gesamt- S	Glüh-verlust
[m u GOK]		[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
26-27		90	1450	1540	0,8
27-28		440	8490	8930	4,6
28-29	W20	230	1940	2170	1,7
29-30		360	4950	5310	1,9
30-31		120	1600	1720	1,5
31-32	W21	420	6910	7330	0,8
32-33		130	450	580	0,7
33-34		130	1620	1750	1,6
34-35	W23	60	640	700	0,5
35-36		190	2130	2310	3,4
36-37		280	2790	3070	2,9
37-38		200	3010	3220	3,4
38-39		240	2980	3220	2,4
39-40		220	3900	4110	2,7
40-41		220	3730	3950	2,4
41-42	W7	90	2410	2500	0,6
42-43	W8	60	2030	2090	0,5
43-44		80	3200	3280	

Tabelle A2-6: TOC, Schwefelspezies und Glühverlust am Sediment Wehnsen nach 570d Versuchsdauer (Batchversuch)

Probe-Nr.	Bohrung	Teufe	TOC	Sulfat-S	Sulfid - S	Gesamt- S	Glüh-verlust
		[m uGOK]	[%]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
W 1/2	2122	33-34	0,17	93	598	691	0,4
W 2/2	2122	34-35	0,47	72	628	700	1,1
W 3/2	2123	42-43	< 0,01	151	2827	2979	0,9
W 4/2	2123	43-44	0,23	65	587	652	0,4
W 7/2	2113	41-42	0,32	63	582	645	0,6
W 8/2	2113	42-43	< 0,01	44	5138	5182	0,6
W 9/2	2122	27-28	2,52	350	2181	2531	5,9
W 10/2	2122	31-32	< 0,01	72	368	440	0,3
W 12/2	2122	44-45	< 0,01	21	9	30	0,6
W 13/2	2123	35-36	0,33	209	1512	1721	1,5
W 14/2	2123	40-41	0,14	95	201	296	0,5
W 15/2	2123	41-42	0,42	128	464	592	1,1
W 16/2	2123	44-45	0,10	92	532	624	0,5
W 16/1	2123	44-45	< 0,01	118	535	653	0,4
W 17/2	2123	45-46	0,10	125	1000	1125	0,5
W 18/2	2123	49-50	< 0,01	37	321	358	0,2
W 19/1	2113	21-22	0,57	138	2131	2269	3,8
W 20/2	2113	28-29	0,76	220	3142	3362	2,9
W 21/1	2113	31-32	1,08	173	4398	4572	3,9
W 22/2	2113	25-26	0,27	37	37	74	1,1
W 22/1	2113	25-26	0,21	34	27	61	1,0
W 23/1	2113	34-35	< 0,01	56	273	329	0,6

2.2.3 Analysen am Bohrgut der Kernbohrungen in Sulingen

Tabelle A2-7.: Feinkornanteil und K-Wert (Beyer), Kernbohrungen Sulingen

Bohrung	128		123	
Parameter / Teufe	K-Beyer	d<0,065mm	K-Beyer	d<0,065mm
[m uGOK]	[m·s^{-1}]	[%]	[m·s^{-1}]	[%]
8			0,000157	5
8,5			0,00029	2
9			0,000116	2
9,5			0,000124	2
10			0,000075	5
10,5	0,000122	0	0,0000822	3
11	0,000129	2		
11,5	0,00011	5		
12	0,00015	2		
12,5	0,000122	0	0,000104	2
13	0,000104	3	0,0000918	3
15	0,0000739	3		
15,5	0,000187	2		
17			0,0000496	3
17,5	0,000115	2		
18	0,0000615	5		
23	0,000116	2	0,0000466	5
23,5	0,0000724	3		18
30,5	0,0000639	3	0,000368	0
31	0,000117	0		
31,5			0,000458	0
32			0,000138	0

Tabelle A2-8: S - Spezies, Kernbohrungen Sulingen

Mess-stelle	Teufe	Angaben in ppm (Gew.)			Angaben in Gew.-%		
	[m u GOK]	Sulfat-S	Sulfid - S	Gesamt- S	Sulfat-S	Sulfid - S	Gesamt- S
128	17.97	39	57	96	0,004	0,006	0,010
128	31	29	471	500	0,003	0,047	0,050
123	16,97	< 10	95	95	< 0,001	0,009	0,009
123	31	18	684	702	0,002	0,068	0,070

Tabelle A2-9: Glühverlust und TOC, Kernbohrungen Sulingen

Bohrung	128		123	
Teufe	Glühverlust	TOC	Glühverlust	TOC
[m uGOK]	[%]	[%]	[%]	[%]
8			0,5	0,018
8,5			0,5	0,015
9			0,5	0,018
9,5			0,6	0,017
10			0,6	0,013
10,5	0,5	0,022	0,6	0,013
11	1	0,012		
11,5	0,8	0,016		
12	0,6	0,014		
12,5	0,8	0,012	0,4	0,013
13	0,7	0,011	0,8	0,018
15	0,9	0,013		
15,5	0,8	0,012		
16,5			1	0,014
17			1	0,027
17,5	0,9	0,015		
18	1,3	0,012		
23	0,6	0,012	1,1	0,024
23,5	0,5	0,011	1,1	0,017
30,5	0,4	0,049	0,3	0,044
31	0,3	0,043		
31,5	0,5	0,022	0,3	0,048
32	1	0,012	0,3	0,018

Tabelle A2-10: TOC, Schwefelspezies und Glühverlust am Sediment Sulingen nach 570d Versuchsdauer (Batchversuch)

Bohrung	Teufe	TOC	Sulfat-S	Sulfid - S	Gesamt- S	Glüh-verlust
	[m u GOK]	[%]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[mg·kg^{-1}]	[%]
128	31	< 0,01	59	191	250	0,3
123	31	< 0,01	67	324	391	0,3

Tabelle A2-11: Korrelationskoeffizienten nach Spearman (r_s) und Anzahl der Datenpaare (n), Gesteinsanalysen Wehnsen

r_s / n	K(S)	K(K)	FK(S)	FK(K)	G(S)	G(K)	TOC	S_{ges}(S)	S_{ges}(K)	Sulfid	Sulfat	C_{HWL}	C_L	DOC_l
K(S)	--	.19	--76**	-.13	-.40**	.18	-.60**	-.02	-.12	-.10	-.31**	-.46	-.59**	-.11
K(K)	59	--	-.43**	-.87**	-.55**	-.35**	-.35**	-10	-.52**	-.51**	-.55**	-.44	-.45	-.22
FK(S)	156	60	--	.35**	.77**	.14	.81**	.40	.38**	.38**	.55**	.39	.65**	-.08
FK(K)	60	88	61	--	.56**	.49**	.31*	.28	.49**	.47**	.53**	.45	.50**	.26
G(S)	157	60	173	61	--	.44**	.79**	.71**	.62**	.61**	.51**	.19	.63**	-.07
G(K)	56	88	57	84	57	--	.30*	.17	.49**	.45**	.48**	.16	.14	.03
TOC	157	60	173	61	174	57	--	.64**	.52**	.52**	.51**	.35	.81**	.06
S_{ges}(S)	19	20	20	17	20	17	20	--	.36	.42	.16	--	--	--
S_{ges}(K)	57	59	58	60	58	61	58	17	--	.99**	.84**	.38	.39	.35
Sulfid	57	59	58	60	58	61	58	17	58	--	.81**	.36	.38	.33
Sulfat	57	59	58	60	58	61	58	17	62	62	--	.47	.50	.50
C_{HWL}	53	19	63	19	63	18	63	7	19	19	19	--	.52	.16
C_L	53	19	61	19	61	18	63	7	19	19	19	63	--	.10
DOC_l	53	19	63	19	63	18	63	7	19	19	19	63	63	--

n: Anzahl der Datenpaare, dargestellt in der rechten, unteren Hälfte, grau hinterlegt, *Signifikanzniveau 0,05, **Sign.-Niveau 0,01
K(S): K-Wert aus Spülbohrung, K(K): K-Wert aus Kernbohrung, FK(S): Feinkornanteil aus Spülbohrung, FK(K): Feinkornanteil aus Kernbohrung, G(S): Glühverlust aus Spülbohrung, G(K): Glühverlust aus Kernbohrung, TOC: Gesamtgehalt organischen Kohlenstoffs, bestimmt an Proben der Spülbohrung, S_{ges}(S): Gesamtschwefelgehalt aus Spülbohrung, S_{ges}(K): Gesamtschwefelgehalt aus der Kernbohrung, Sulfid: Sulfidschwefelgehalt (Kernbohrung), Sulfat: Sulfatschwefelgehalt (Kernbohrung), C_{HWL}: heißwasserlöslicher Kohlenstoffgehalt, c_L: Gehalt labilen Kohlenstoffs, DOC_l: Gehalt an löslichem organischen Kohlenstoff

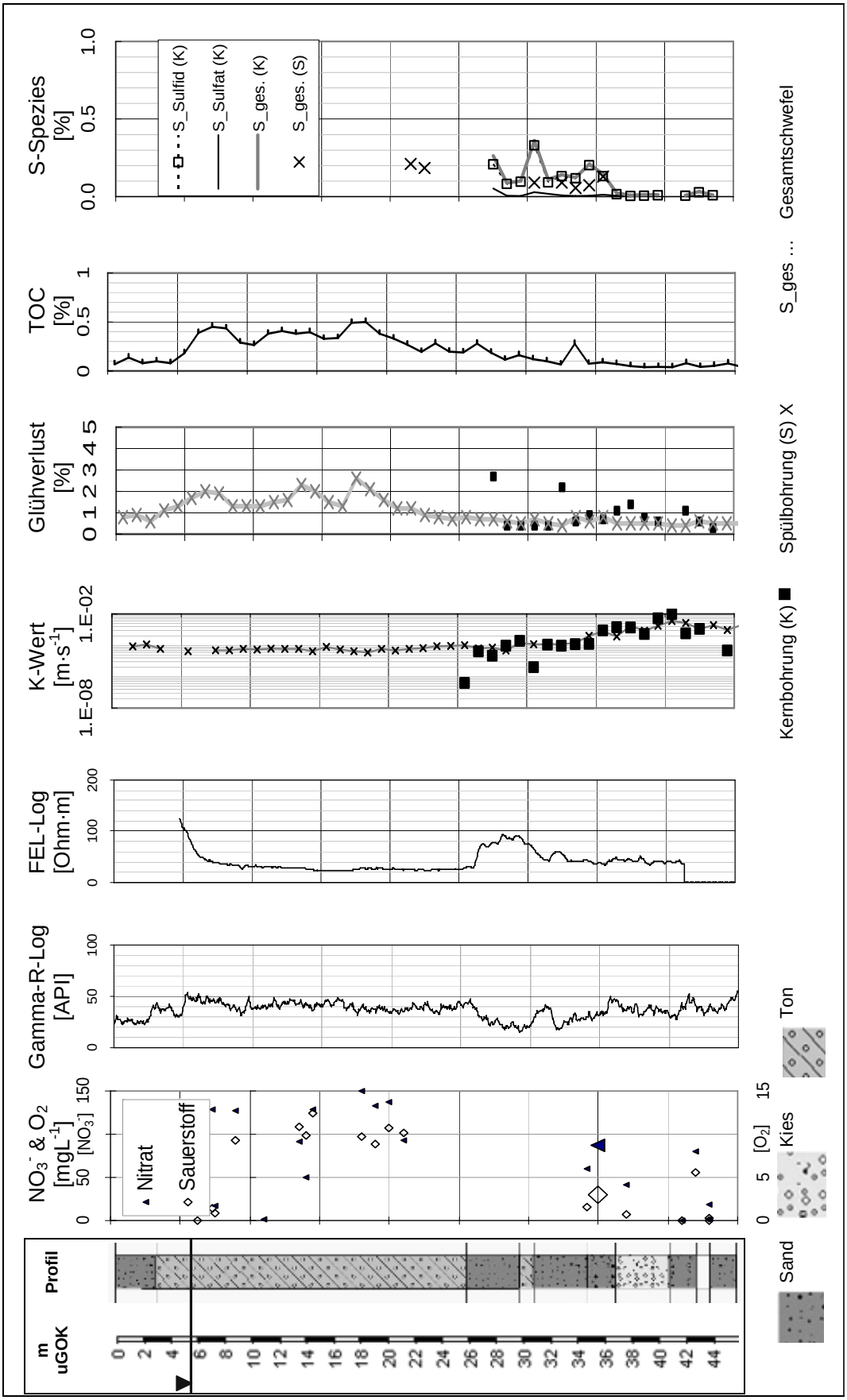


Abbildung A2-1: Vertikalprofile für Spül- und Kernbohrung W2122 in Wehnsen

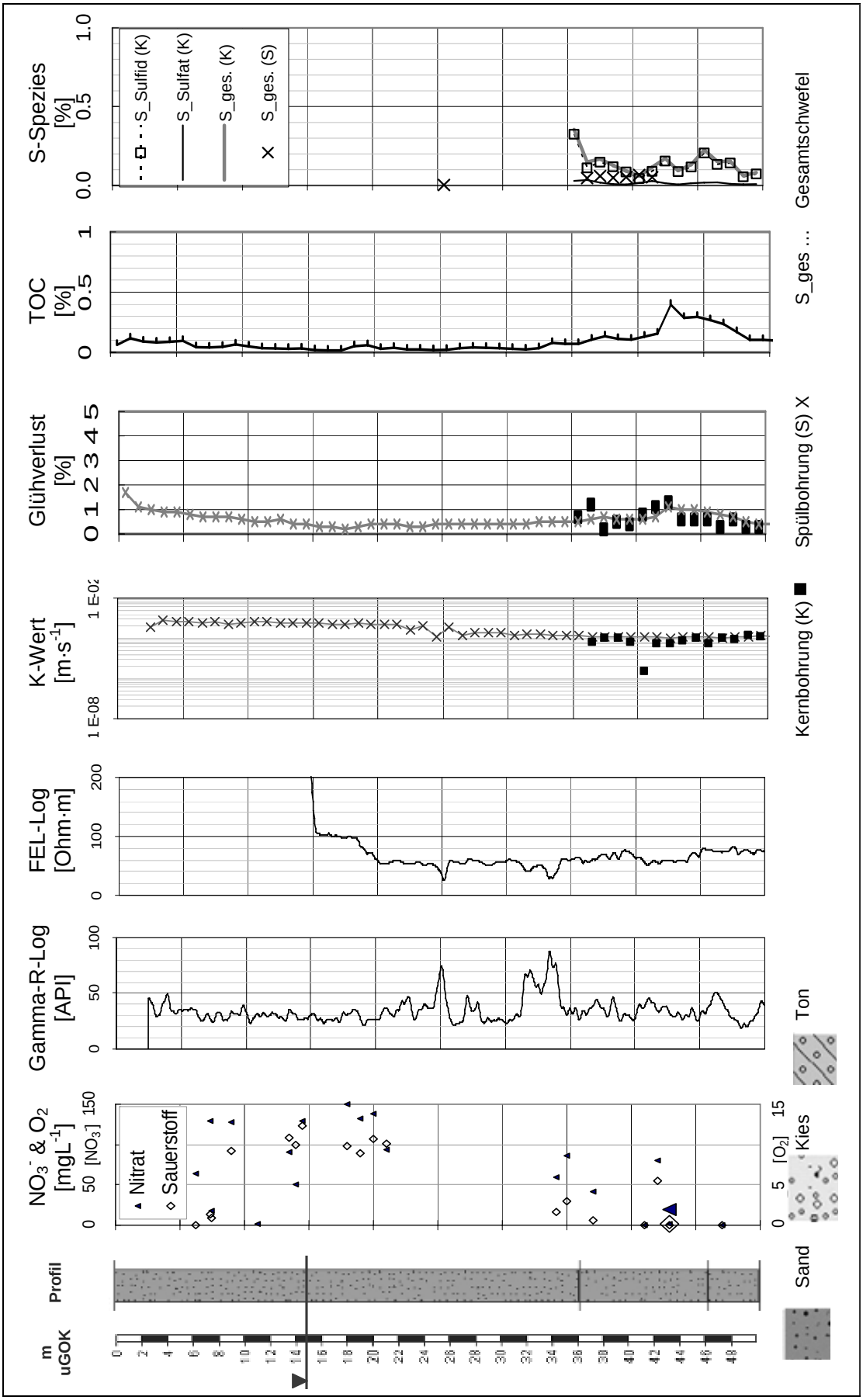
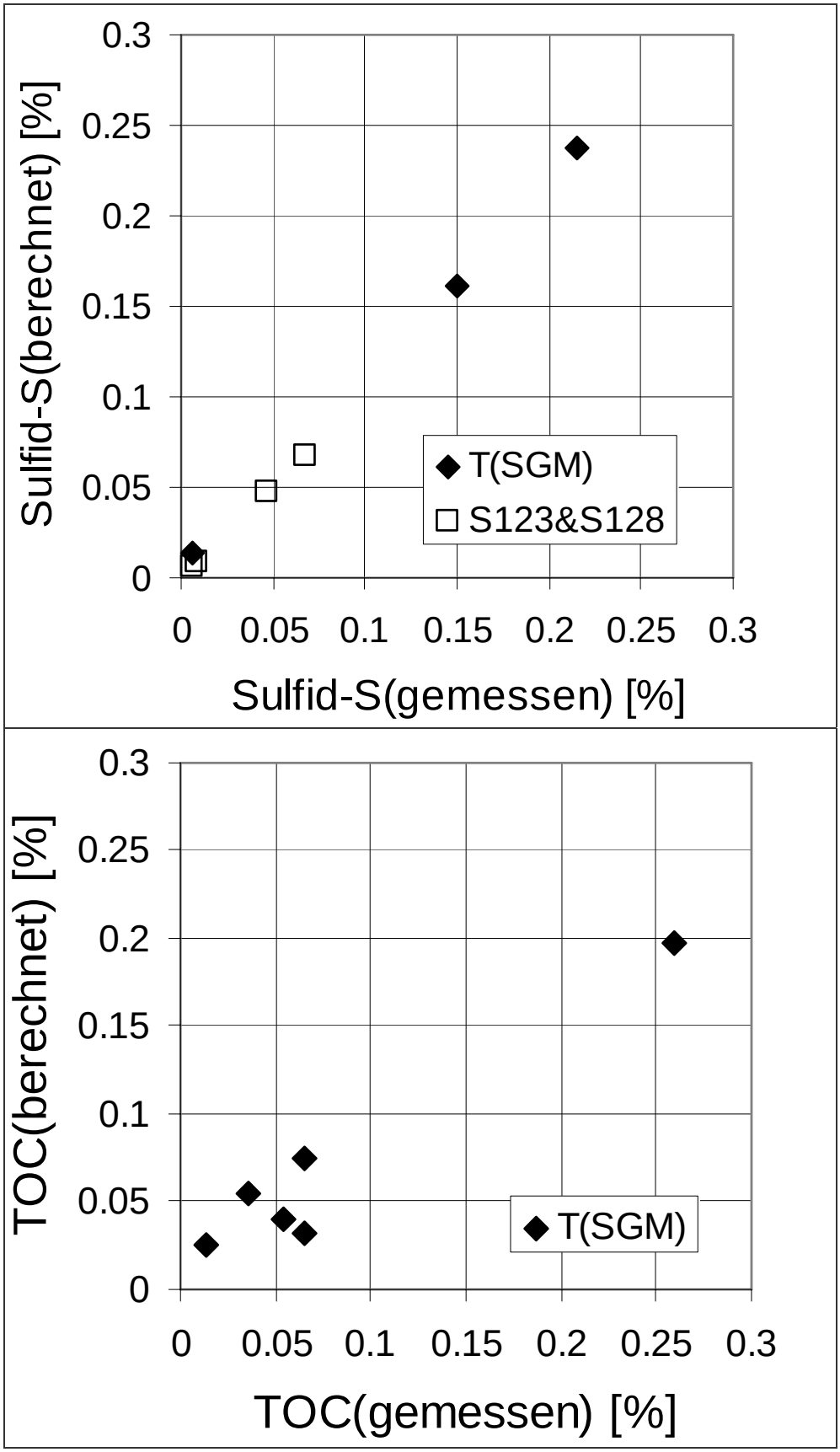


Abbildung A2-2: Vertikalprofile für Spül- und Kernbohrung W2123 in Wehnsen



T: Standort Thülsfelde, S: Standort Sulingen

Abbildung A2-3: Vergleich gemessener und berechneter Werte für die Gehalte an TOC und Sulfid-S für Sulingen und Thülsfelde

Anlage 2, Teil II

Laborversuche

2.3 Probenahme und Analyse bei den Batchversuchen

Die Probenahmen erfolgen in einer mit N_2 begasten Glove-Box (Handschuhkasten). Die Proben wurden aus der Glasflasche wie folgt entnommen: Zuerst werden mit einer Gasspritze mit Kanüle aus dem Gasraum 30 ml Gas entnommen und in 2 evakuierte Glasröhrchen (LABCO®), die mit einem Septum verschlossen sind, gegeben. Anschließend wurde der Gasraum mit N_2 wieder aufgefüllt. Mit einer Spritze mit Kanüle werden 10 bis 11 ml Wasser entnommen. Das Wasser wird in PE-Flaschen bis zur Analyse kühl und dunkel gelagert. Das entnommene Wasservolumen wird mit entgaster Testlösung wieder aufgefüllt.

Analyse des Gases: Die Gasproben wurden gaschromatographisch im Kompetenzzentrum Stabile Isotope, Forschungszentrum Waldökosysteme der Universität Göttingen auf die Gehalte an $^{15}N_2$ und N_2O hin untersucht und umgerechnet, siehe WELL & MYRROLD (1999) und WELL & MYRROLD (2002).

Analyse des Wassers: Die Wasserproben werden am Ionenchromatographen DIONEX DX 120, Säule AS 14 im Institut für Grundwasserwirtschaft auf den Gehalt an Anionen hin untersucht. Die Kationen, ausgenommen NH_4^+ und Al^{3+} werden mittels AAS, Perkin Elmer, bestimmt. NH_4^+ wird photometrisch mit Lambda 10, Perkin Elmer, bestimmt. Mit dem Graphitrohr-AAS SIMAA 6000, Perkin Elmer, wird Al^{3+} bestimmt.

2.4 Auswertung der Batchversuche

Beeinflussung der Wasserbeschaffenheit durch die Probenahmen

Nach der Probenentnahme wurden die Volumina der entnommenen Wasser- und Gasproben durch Injektion der Testlösung und von N_2 aus der Gasflasche wieder ersetzt. Dadurch wurde die Konzentration des Nitrates im Wasser und die der Gase $^{15}N_2$ und N_2O im *Headspace* (Gasraum im Versuchsgefäß) nach jeder Beprobung verändert. Dementsprechend musste eine Umrechnung (Mischungsrechnung) der gemessenen Werte zu korrigierten Werten, mit denen die tatsächliche Abbauleistung ermittelt werden kann, durchgeführt werden. Dazu wird folgende Bilanz, die für Nitrat, Nitrit, Sulfat und die N-Gase jeweils gleich ist, aufgestellt:

$M_{neu,gesamt} = M_{Flasche,gemessen} + M_{Injektion}$

$M_{neu,gesamt}$ … Masse an Nitrat, Sulfat, Nitrit bzw. der Gase nach Auffüllung der Versuchsflasche mit Testlösung (Injektion)

$M_{Flasche,gemessen}$ … Masse an Nitrat, Sulfat, Nitrit bzw. der Gase in der Versuchsflasche nach der Probenentnahme

$M_{Injektion}$ … Masse an Nitrat, Sulfat, Nitrit bzw. der Gase, welche nach der Probenahme wieder aufgefüllt (injiziert) wird. Für Nitrat und Sulfat ist dies die Masse, die die injizierte Testlösung enthält.

Aus diesem Bilanzansatz kann die veränderte Konzentration $\beta_{neu}(x)$ nach Injektion mit Versuchslösung berechnet werden. In diesem Fall steht x für die jeweils betrachtete Substanz. Für die Gase $^{15}N_2$ und N_2O gilt eine analoge Mischungsrechnung. Beide Gase liegen sowohl gelöst als auch in der Gasphase vor. Zwischen beiden Konzentrationen herrscht ein

Gleichgewichtszustand, der durch die Löslichkeit und den Gas-Wasser-Verteilungskoeffizienten des jeweiligen Gases und durch die Temperatur bestimmt wird. Die Versuche wurden bei einer konstanten Temperatur von 10°C durchgeführt und auch beprobt. Wird eine Gasprobe für die Analyse entnommen, wird die adäquate Menge an nicht markiertem, N_2O - freiem N_2 wieder zugeführt. Das bedeutet, die Konzentration eines markierten Gases im *Headspace* verändert sich. Unmittelbar nach der Gasprobenahme wird für die Analyse des Nitrates, Sulfates und Nitrits Wasser entnommen, welches gelöste markierte Gase enthalten kann. Diese Wassermenge wird durch eine Testlösung ersetzt, die frei von $^{15}N_2$- und N_2O ist. Das zieht wiederum eine Änderung der Konzentration an gelöstem markiertem Gas im Batchgefäß nach sich. Beide Probenahmen müssen jeweils durch eine Mischungsrechnung berücksichtigt werden.

2.4 Daten der Batchversuche

Vorbemerkung: Die in den folgenden Tabellen angegebenen Werte sind für den jeweiligen Batchversuch die Mittelwerte aus den 3 Parallelansätzen. Die „Rohdaten“, d.h. die Messwerte der Lösungen sind für die Einzelversuche in Anlage 7 angegeben.

Tabelle A2-12: Ergebnisse der Batchversuche NO_2^-(t) für Wehnsen (W) und Sulingen (S)

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	Nitritbildung[1)] nach Versuchsdauer t in Tagen:							
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d	570d
[m u GOK]		[kg]	[mg·kg^{-1}]N							
Bohrung W2122										
-31,5	W10	0,260	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05	0,05	0,08
-34,5	W2	0,261	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,09	0,14	0,00
Bohrung W2113										
-18,5	W5	0,256	0,00	1,01	1,97	3,19	0,63	1,49		
-19,5	W6	0,259	0,00	0,99	1,92	3,11	0,62	1,46		
-21,5	W19	0,215	0,00	0,00	0,00	0,00	5,60	15,46	15,44	13,81
-25,5	W22	0,257	0,00	0,00	0,00	0,08	0,14	0,00	0,00	0,00
-28,5	W20	0,226	0,00	0,00	0,96	0,04	8,12	4,84	6,07	7,10
-31,5	W21	0,217	0,00	0,00	0,15	0,01	7,57	1,81	2,95	11,50
-34,5	W23	0,275	0,36	1,02	3,81	9,38	2,70	3,08	2,35	2,10
-41,5	W7	0,275	0,00	2,26	3,61	4,86	3,36	4,19	3,91	0,00
-42,5	W8	0,275	0,00	0,87	1,70	2,76	0,56	1,30	0,46	0,00
Bohrung S117/123										
-34	S(2)	0,262	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,054	0,002	0,002
Bohrung S118/128										
-34	S(4)	0,262	0,000	0,000	0,001	0,003	0,005	0,012	0,021	0,000

[1)] es sind nur die Versuche mit Nitritbildung angegeben

Tabelle A2-13: Ergebnisse der Batchversuche E(t) für Wehnsen (W) und Sulingen (S)

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	Elimination E(t) von Nitrat nach Versuchsdauer t in Tagen:							
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d	570d
[m u GOK]		[kg]	[mg·kg^{-1}]N							
Bohrung W2123										
-35,5	W13	0,258	-0,45	-0,94	-3,88	-21,47	-29,92	-60,64	-108,88	-208,5
-40,5	W14	0,247	-0,40	-1,36	-2,38	-9,12	-26,43	-34,69	-47,17	-91,1
-41,5	W15	0,255	-0,90	-1,59	-3,10	-12,99	-30,05	-60,91	-104,50	-207,8
-42,5	W3	0,248	-1,76	-2,81	-3,65	-10,18	-31,74	-62,26	-104,28	-194
-43,5	W4	0,248	-1,58	-2,71	-3,52	-6,58	-11,39	-20,16	-26,23	-41,9
-44,5	W16	0,256	-0,09	-1,22	-1,85	-4,77	-13,20	-30,28	-50,69	-72,3
-45,5	W17	0,259	-0,59	-2,93	-4,63	-8,70	-20,31	-30,99	-54,40	-135,1
-49,5	W18	0,261	-0,47	-1,04	-1,42	-2,80	-8,97	-13,41	-16,55	-24,9
Bohrung W2122										
-27,5	W9	0,240	-0,39	-1,18	-1,60	-21,94	-32,11	-74,20	-113,51	-266,9
-31,5	W10	0,260	-0,39	-0,74	-1,13	-1,76	-2,71	-6,11	-15,61	-39,2
-33,5	W1	0,250	-0,87	-1,61	-1,71	-4,24	-6,62	-13,83	-21,08	-39,05
-34,5	W2	0,261	-0,37	-1,66	-2,98	-6,49	-14,10	-21,17	-27,82	-37,6
-38,5	W11	0,275	-0,10	0,09	-0,52	-0,52	-0,78	-0,97	-1,43	
-44,5	W12	0,276	-0,14	-0,10	-0,22	-0,51	-1,20	-1,26	-1,83	
Bohrung W2113										
-18,5	W5	0,256	-0,77	-0,92	-1,42	-1,52	-1,34	-1,55	-2,03	
-19,5	W6	0,259	-0,33	-0,61	-1,59	-1,79	-1,42	-0,87	-1,76	
-21,5	W19	0,215	-0,61	-1,13	-12,7	-38,84	-94,25	-124,3	-129,43	-127,9
-25,5	W22	0,257	-0,37	-0,34	-0,42	-0,69	-1,10	-3,63	-3,23	-3
-28,5	W20	0,226	-1,76	-2,95	-32,8	-36,19	-131,6	-169,5	-198,72	-260
-31,5	W21	0,217	-0,59	-2,15	-36,9	-38,95	-137,6	-175,6	-185,38	-270
-34,5	W23	0,275	-0,41	-0,93	-4,82	-14,80	-11,13	-12,60	-7,83	-8
-41,5	W7	0,275	-0,82	-1,29	-5,96	-12,45	-16,82	-22,26	-27,27	-35,4
-42,5	W8	0,275	-0,89	-1,37	-3,43	-6,00	-8,00	-10,80	-15,69	-24
Bohrung S117/123										
-17	S(1)	0,257	-0,08	-0,26	-0,33	-0, 48	-0,26	-2,45		
-34	S(2)	0,262	-1,36	-2,79	-3,04	-3,82	-4,66	-8,65	-10,31	-12,21
Bohrung S118/128										
-18	S(3)	0,258	-2,91	-3,94	-4,05	-3,68	-3,38	-4.29		
-34	S(4)	0,262	-1,03	-1,53	-1,45	-1,57	-3,71	-5,74	-5,54	

Tabelle A2-14: Lachgasbildung bei den Batchversuchen an Proben aus Wehnsen und Sulingen

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	Lachgasbildung (N_2O-Konzentration) nach Versuchsdauer t in Tagen:							
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d	570d
[m u GOK]		[kg]	[mg·kg^{-1}]N							
Bohrung W2123										
-35,5	W13	0,258	0,006	0,021	0,482	0,063	0,047	0,057	0,097	13,953
-40,5	W14	0,247	0,027	0,098	0,272	0,053	0,042	0,038	6,130	17,814
-41,5	W15	0,255	0,099	0,133	0,371	0,058	0,061	0,247	2,510	1,843
-42,5	W3	0,248	0,000	0,013	0,140	0,171	0,041	0,274	14,090	45,565
-43,5	W4	0,248	0,000	0,068	0,230	0,221	0,050	0,056	0,234	2,823
-44,5	W16	0,256	0,074	0,166	0,325	0,218	7,355	30,939	36,720	42,578
-45,5	W17	0,259	0,095	0,336	0,202	0,116	6,476	9,415	23,590	37,838
-49,5	W18	0,261	0,002	0,034	0,182	0,018	0,120	0,219	10,190	1,073

Tabelle A2-14: Lachgasbildung bei den Batchversuchen an Proben aus Wehnsen und Sulingen

- Fortsetzung -

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	Lachgasbildung (N_2O-Konzentration) nach Versuchsdauer t in Tagen:							
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d	570d
[m u GOK]		[kg]	[mg·kg^{-1}]N							
Bohrung W2122										
-27,5	W9	0,240	0,005	0,024	0,097	0,082	0,018	0,021	0,040	
-31,5	W10	0,260	0,015	0,039	0,016	0,119	0,017	0,058	0,104	10,192
-33,5	W1	0,250	0,000	0,009	0,002	0,432	0,067	0,045	0,056	1,240
-34,5	W2	0,261	0,000	0,012	0,011	0,251	0,512	0,071	0,199	0,230
-38,5	W11	0,275	0,000	0,000	0,001	0,048	0,045	0,050		
-44,5	W12	0,276	0,006	0,005	0,006	0,122	0,190	0,179		
Bohrung W2113										
-18,5	W5	0,256	0,000	0,000	0,001	0,002	0,010	0,007		
-19,5	W6	0,259	0,000	0,000	0,000	0,160	0,015	0,020		
-21,5	W19	0,215	0,001	0,013	0,001	0,818	0,222	2,200	6,500	17,209
-25,5	W22	0,257	0,003	0,002	0,009	0,048	0,008	0,009	0,010	0,195
-28,5	W20	0,226	0,006	0,379	0,032	0,085	17,475	11,262	7,700	7,124
-31,5	W21	0,217	0,003	0,365	0,030	0,036	1,654	0,816	0,852	13,825
-34,5	W23	0,275	0,001	0,003	0,017	1,878	2,368	0,865	0,620	0,767
-41,5	W7	0,275	0,000	0,011	0,019	0,475	1,422	0,180	0,246	0,251
Bohrung W2113										
-42,5	W8	0,275	0,000	0,000	0,029	0,074	3,183	2,414	3,924	5,673
Bohrung S117/123										
-17	S(1)	0,257	0,000	0,002	0,002	0,0002	0,005	0,01658		
-34	S(2)	0,262	0,000	0,000	0,011	0,004	0,086	0,031	0,061	0,183
Bohrung S118/128										
-18	S(3)	0,258	0,000	0,001	0,001	0,000	0,007	0,003	2,575	
-34	S(4)	0,262	0,001	0,002	0,002	0,011	0,005	0,007	0,094	

Tabelle A2-15: N_2-Bildung bei den Batchversuchen an Proben aus Wehnsen (W) und Sulingen (S)

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	N_2 - Bildung ($N_{2(Deni)}$ – Konzentration) nach Versuchsdauer t in Tagen:							
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d	570d
[m u GOK]		[kg]	[mg·kg^{-1}]N							
Bohrung W2123										
-35,5	W13	0,258	0,355	0,669	1,548	14,858	21,478	50,631	85,570	143,80
-40,5	W14	0,247	0,297	0,494	0,841	6,053	20,076	26,628	28,100	29,55
-41,5	W15	0,255	0,303	0,823	1,476	8,951	22,559	50,652	79,180	158,04
-42,5	W3	0,248	0,280	0,526	0,933	5,418	22,496	44,496	64,230	93,95
-43,5	W4	0,248	0,252	0,379	0,758	2,781	7,962	11,679	15,890	24,60
-44,5	W16	0,256	0,299	0,585	1,267	3,178	2,297	0,808	0,900	1,21
-45,5	W17	0,259	0,410	1,353	2,877	6,326	7,489	14,704	13,130	15,06
-49,5	W18	0,261	0,284	0,519	0,878	2,513	6,204	8,832	0,345	16,28
Bohrung W2122										
-27,5	W9	0,240	0,275	0,409	0,646	16,306	24,609	47,366	83,96	
-31,5	W10	0,260	0,249	0,324	0,498	0,883	1,786	4,170	9,810	11,73
-33,5	W1	0,250	0,033	0,067	0,196	1,196	4,427	7,440	12,080	20,84
-34,5	W2	0,261	0,107	0,329	0,921	2,572	4,407	13,003	15,580	21,80
-38,5	W11	0,275	0,191	0,206	0,233	0,253	0,102	0,618		
-44,5	W12	0,276	0,195	0,227	0,280	0,417	0,270	0,361		
Bohrung W2113										
-18,5	W5	0,256	0,188	0,204	0,224	0,274	0,130	0,628		
-19,5	W6	0,259	0,192	0,209	0,219	0,196	0,102	0,277		
-21,5	W19	0,215	0,722	1,004	5,188	26,004	56,103	58,000	60,000	74,84
-25,5	W22	0,257	0,223	0,293	0,422	0,406	0,834	1,500	0,980	1,48
-28,5	W20	0,226	0,436	0,974	16,964	26,302	96,865	142,448	160,600	208,76
-31,5	W21	0,217	0,443	1,229	14,692	27,452	120,605	149,400	167,650	202,30
-34,5	W23	0,275	0,208	0,369	0,895	1,408	2,683	4,276	5,050	7,42
-41,5	W7	0,275	0,274	0,493	0,941	3,680	7,100	9,789	13,250	20,22
-42,5	W8	0,275	0,197	0,266	0,404	1,527	1,009	2,221	3,479	5,45
Bohrung S117/123										
-17	S(1)	0,257	0,181	0,178	0,166	0,182	0,239	0,132		
-34	S(2)	0,262	0,108	0,161	0,529	1,554	2,348	1,716	1,781	1,685
Bohrung S118/128										
-18	S(3)	0,258	0,123	0,119	0,160	0,190	0,077	0,089	0,079	
-34	S(4)	0,262	0,009	0,050	0,117	0,352	0,196	0,180	0,293	

Tabelle A2-16: Sulfat - Bildung bei den Batchversuchen an Proben aus Wehnsen und Sulingen

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	SO_4^{2-} - Bildung[2)] nach Versuchsdauer t in Tagen:							
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d	570d
[m u GOK]		[kg]	[mg·kg^{-1}]SO_4^{2-}							
Bohrung W2123										
-35,5	W13	0,258	-0,12	1,32	9,57	77,16	176,98	381,28	605,22	1115,6
-40,5	W14	0,247	-1,16	-2,13	4,65	44,93	139,82	231,77	294,66	521,46
-41,5	W15	0,255	-4,70	-1,94	-1,33	35,38	94,44	237,53	396,37	813,17
-42,5	W3	0,248	-6,45	-15,67	-10,1	26,86	145,33	301,48	484,66	935,12
-43,5	W4	0,248	-4,24	-9,71	-8,07	15,05	70,96	104,40	199,08	291,22
-44,5	W16	0,256	-0,08	1,83	8,97	46,09	94,21	213,29	321,46	517,56
-45,5	W17	0,259	-1,37	6,44	19,90	58,15	109,99	257,90	368,77	785,37
-49,5	W18	0,261	0,24	-0,27	2,40	18,97	42,77	74,76	110,27	190,73
Bohrung W2122										
-27,5	W9	0,240	-0,33	-7,60	-5,52	10,76	60,70	142,28	294,59	938,54
-31,5	W10	0,260	1,13	0,41	3,57	24,11	53,17	85,35	157,50	398,78
-33,5	W1	0,250	-1,39	-3,30	-1,48	18,74	59,20	88,69	179,45	306,63
-34,5	W2	0,261	-4,66	-6,74	-7,78	-1,58	24,56	43,10	93,24	167,51
-38,5	W11	0,275	1,29	-0,69	0,88	15,04	17,01	16,29	25,58	
-44,5	W12	0,276	-0,13	-3,40	-1,87	6,02	9,02	13,67	17,48	
Bohrung W2113										
-18,5	W5	0,256	6,88	2,15	-3,59	-4,74	-5,57	-1,43	-4,65	
-19,5	W6	0,259	5,32	-0,42	-3,65	-4,91	-5,84	-5,45	-3,50	
-21,5	W19	0,215	-2,20	-3,04	6,13	24,46	65,24	117,98	221,21	238,54
-25,5	W22	0,257	-1,86	-1,32	1,37	11,88	20,19	33,02	36,25	47,80
-28,5	W20	0,226	16,88	23,99	79,81	141,75	391,48	544,12	620,83	839,51
-31,5	W21	0,217	15,18	23,17	70,30	113,56	288,01	360,30	404,18	546,34
-34,5	W23	0,275	-3,68	2,69	15,57	44,37	56,44	80,99	93,32	108,29
-41,5	W7	0,275	-2,12	1,81	5,02	23,23	44,41	61,04	94,01	206,34
-42,5	W8	0,275	-4,01	-3,12	1,00	19,72	35,53	57,01	110,16	186,34
Bohrung S117/123										
-17	S(1)	0,257	0,22	1,89	1,64	-5,62	-6,31	-7,22	-6,58	
-34	S(2)	0,262	-2,59	-4,38	-4,01	4,35	29,22	100,78	200,00	433,79
Bohrung S118/128										
-18	S(3)	0,258	-2,72	-4,85	-5,62	-9,35	-11,01	-12,02	-10,66	
-34	S(4)	0,262	9,74	12,35	18,31	39,45	109,66	210,60	303,03	

[2)]Negative werden kennzeichnen einen Sulfatverbrauch

Tabelle A2-17: CO_2-Gehalt in den Batchversuchen an Proben aus Wehnsen (W) und Sulingen (S)

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	CO_2 – Gehalt im Gasraum [%] nach Versuchsdauer t in Tagen:						
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d
[m u GOK]		[kg]	[%] CO_2 im Gasraum (*headspace)* des Batchgefäßes						
Bohrung W2123									
-35,5	W13	0,258	2,51		2,26	2,22	0,76	0,65	0,72
-40,5	W14	0,247	2,51		2,40	2,32	0,78	0,56	0,26
-41,5	W15	0,255	3,05		3,11	2,30	1,21	1,03	0,80
-42,5	W3	0,248		2,31		2,65	0,97	0,47	0,73
-43,5	W4	0,248		2,09		2,08	0,98	0,77	0,81
-44,5	W16	0,256			2,72		1,12	0,92	0,67
-45,5	W17	0,259			1,98		1,04	0,84	0,68

Tabelle A2-17: CO_2-Gehalt in den Batchversuchen an Proben aus Wehnsen und Sulingen - Fortsetzung -

Tiefe	Bezeichnung	Trocken-masse	CO_2 – Gehalt im Gasraum [%] nach Versuchsdauer t in Tagen:						
			2d	7d	21d	84d	184d	275d	365d
[m u GOK]		[kg]	[%] CO_2 im Gasraum (*headspace)* des Batchgefäßes						
Bohrung W2123									
-49,5	W18	0,261					0,69	0,71	0,66
Bohrung W2122									
-27,5	W9	0,240	1,68	2,44	2,22	2,36	0,81	0,72	0,10
-31,5	W10	0,260	1,45	1,73	1,61	1,98	0,73	0,61	0,52
-33,5	W1	0,250		0,78		1,29	0,61	0,62	0,18
-34,5	W2	0,261		0,83		1,16	0,38	0,33	0,76
-38,5	W11	0,275	1,52	1,83	1,67	1,74	0,66	0,61	
-44,5	W12	0,276	0,70	0,96	1,04	1,86	0,53	0,44	
Bohrung W2113									
-18,5	W5	0,256	1,10	1,26	0,99	1,50	0,62	0,60	
-19,5	W6	0,259	1,28	1,44	1,46	0,73	0,60	0,43	
-21,5	W19	0,215	0,62	0,63	0,61	0,06	0,03	0,04	0,06
-25,5	W22	0,257	1,61	1,82		1,02	0,79	0,69	0,60
-28,5	W20	0,226	1,87	1,83	1,43	0,73	0,20	0,21	0,04
-31,5	W21	0,217	1,50	1,54	1,06	0,69	0,18	0,30	0,21
-34,5	W23	0,275	0,35	0,39		0,55	0,44	0,04	0,43
-41,5	W7	0,275	0,18	0,23	0,26	0,48	0,13	0,14	0,15
-42,5	W8	0,275	0,30	0,37	0,45	1,57	0,24	0,22	0,27

Tabelle A2-18: Standardabweichung (±s) von E(t) und G(t)

Tiefe	Probe	Standardabweichung ±s(t) [mg·kg^{-1}]N von E(t)					Standardabweichung ±s(t) [mg·kg^{-1}]N von G(t)				
		Versuchsdauer (t)					Versuchsdauer (t)				
[m u GOK]		2d	7d	21d	84d	184d	2d	7d	21d	84d	184d
Bohrung W2123											
-35,5	W13	0,56	0,71	0,49	0,69	0,51	0,02	0,03	0,06	0,31	0,21
-40,5	W14	0,58	0,55	0,36	0,19	1,33	0,01	0,03	0,04	0,08	1,65
-41,5	W15	0,44	0,66	0,33	0,83	0,35	0,00	0,03	0,07	0,44	0,72
-42,5	W3	0,34	0,39	0,10	0,89	0,17	0,02	0,03	0,03	0,21	0,42
-43,5	W4	0,27	0,09	0,11	0,11	0,21	0,01	0,02	0,04	0,03	0,09
-44,5	W16	0,06	0,37	0,12	0,55	2,29	0,02	0,03	0,20	0,21	1,98
-45,5	W17	0,08	0,11	0,14	0,14	3,71	0,02	0,12	0,13	0,12	3,06
-49,5	W18	0,17	0,22	0,39	0,33	0,26	0,00	0,04	0,06	0,04	0,01
Bohrung W2122											
-27,5	W9	0,18	0,16	0,07	1,17	0,19	0,01	0,01	0,03	1,02	0,01
-31,5	W10	0,16	0,19	0,27	0,16	0,37	0,01	0,01	0,02	0,20	0,05
-33,5	W1	0,19	0,05	0,08	0,37	0,24	0,01	0,01	0,02	0,42	0,22
-34,5	W2	0,17	0,02	0,23	0,18	0,27	0,01	0,02	0,02	0,10	0,18
-38,5	W11	0,02	0,09	0,09	0,05	0,15	0,00	0,00	0,01	0,03	0,06
-44,5	W12	0,09	0,06	0,01	0,18	0,10	0,00	0,00	0,00	0,08	0,05
Bohrung W2113											
-18,5	W5	0,22	0,18	0,15	0,11	0,14	0,00	0,01	0,00	0,02	0,04
-19,5	W6	0,16	0,15	0,08	0,15	0,09	0,00	0,00	0,00	0,18	0,02
-21,5	W19	1,48	1,50	1,52	1,49	2,27	0,14	0,20	0,14	0,24	1,22
-25,5	W22	0,09	0,05	0,18	0,25	0,38	0,00	0,01	0,03	0,28	0,25
-28,5	W20	1,26	1,15	0,81	1,17	1,54	0,00	0,00	0,67	0,05	0,90
-31,5	W21	0,24	0,70	0,32	0,24	3,00	0,02	0,32		0,94	8,07
-34,5	W23	0,19	0,25	0,69	0,45	0,79	0,00	0,01	0,04	0,09	0,15
-41,5	W7	0,14	0,29	0,06	0,59	1,47	0,01	0,03	0,04	0,39	0,80
-42,5	W8	0,31	0,17	0,37	0,45	0,82	0,00	0,01	0,02	0,11	0,00

Tabelle A2-19: Ausgewählte Parameter der Batchversuche Wehnsen zu Versuchsbeginn, nach 184d und 570d Versuchsdauer, Teil I

Parameter	O_2	O_2	Eh	Eh	Eh	pH	pH	pH	Lf	Lf	Lf	HCO_3^-	HCO_3^-	HCO_3^-	Mn_{ges}	Mn_{ges}	Mn_{ges}	Fe_{ges}	Fe_{ges}	Fe_{ges}
Zeitpunkt[1)]	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d
Bezeichnung	[mg/l]	[mg/l]	[mV]	[mV]	[mV]	[--]	[--]	[--]	[mS/cm]	[mS/cm]	[mS/cm]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
W13	0.12	1.61	215	119	309	7.6	5.01	4.5	612	810	1476	77.17	2.32	1.34	0.4	0.4	0.94	<0.2	<0.2	0.58
W14	0.24	1.12	215	62	385	7.6	5.26	4.79	612	606	920	77.17	3.78	2.93	0.4	0.32	0.44	<0.2	<0.2	<0.2
W15	0.46	0.11	215	131	379	7.6	5.52	5.03	612	780	1362	77.17	4.39	4.27	0.4	0.34	0.62	<0.2	<0.2	<0.2
W3	0.78	0.18	218	132	394	7.7	5.97	4.83	620	777	1350	77.96	3.9	3.29	0.4	0.32	0.65	0.73	<0.2	<0.2
W4	0.35	0.11	218	95	350	7.7	6.14	5.41	620	611	834	77.96	9.58	4.27	0.4	0.4	0.62	0.73	<0.2	<0.2
W16	0.24	0.16	217	186	418	7.8	3.88	3.51	608	782	1204	76.74	n.n.	n.n.	0.4	0.7	0.84	<0.2	0.22	9.5
W17	0.44	0.06	217	203	401	7.8	4.08	3.55	608	769	1327	76.74	n.n.	n.n.	0.4	0.55	0.89	<0.2	<0.2	15.5
W18	0.17	0.18	217	134	368	7.8	6.74	5.16	608	564	629	76.74	15.86	3.66	0.4	0.29	0.47	<0.2	<0.2	<0.2
W9	0.16	0.14	218	79	282	7.5	6.41	5.8	472	357	1335	75.34	4.76	7.93	0.4	0	0.23	<0.2	<0.2	<0.2
W10	0.34	0.38	218	105	403	7.5	5.85	4.28	472	522	959	75.34	6.1	n.n.	0.4	0.12	0.42	<0.2	<0.2	0.2
W1	0.13	0.09	208	59	357	7.6	6.72	4.89	481	507	923	67.77	15.25	2.93	0.08	0	0.2	<0.2	<0.2	<0.2
W2	0.5	0.16	208	11	284	7.6	7.74	7.47	481	511	738	67.77	165	160.7	0.08	0.12	0.21	<0.2	<0.2	<0.2
W11	0.46	V.a.	218	69	V.a.	7.5	6.64	V.a.	472	429	V.a.	75.34	17.45	V.a.	0.4	0.42	V.a.	<0.2	<0.2	V.a.
W12	1.15	V.a.	218	61	V.a.	7.5	6.61	V.a.	472	448	V.a.	75.34	33.18	V.a.	0.4	0.29	V.a.	<0.2	<0.2	V.a.
W5	0.4	V.a.	218	47	V.a.	7.5	7.07	V.a.	626	524	V.a.	77.41	39.41	V.a.	0.4	0	V.a.	0.53	<0.2	V.a.
W6	0.87	V.a.	218	60	V.a.	7.5	6.69	V.a.	626	527	V.a.	77.41	30.93	V.a.	0.4	0	V.a.	0.53	<0.2	V.a.
W19	0.21	0.27	220	69	181	7.5	7.36	7.67	617	563	755	77.29	54.9	58.56	0.4	0	0	0.55	<0.2	0.25
W22	0.18	0.75	212	76	218	7.5	7.01	6.48	613	546	557	76.31	20.74	17	0.4	0.27	0.29	0.24	<0.2	<0.2
W20	0.15	0.41	220	22	198	7.5	7.78	7.7	617	894	1054	77.29	129.6	123.2	0.4	0.17	0.24	0.55	<0.2	0.46
W21	0.13	0.28	220	30	187	7.5	7.94	7.68	617	805	959	77.29	n.n.	198.3	0.4	0.16	0.33	0.55	<0.2	<0.2
W23	0.44	0.37	212	17	190	7.5	7.58	7.69	613	785	781	76.31	138.4	158	0.4	0.62	0.1	0.24	<0.2	0.17
W7	0.11	0.61	218	13	200	7.5	7.61	7.55	626	595	848	77.41	100.7	124.4	0.4	0.28	0.54	0.53	<0.2	1.1
W8	0.42	0.4	218	10	204	7.5	7.75	7.6	626	728	808	77.41	122.6	132.1	0.4	0.38	0.68	0.53	<0.2	<0.2

Legende V.a. : Versuch aufgelöst Eh : Redoxpotential n.n. : nicht nachweisbar Lf : elektrische Leitfähigkeit

[1)] Zeitpunkt der Probenahme nach Versuchsbeginn in Tagen

Tabelle A2-19: Ausgewählte Parameter der Batchversuche Wehnsen zu Versuchsbeginn, nach 184d und 570d Versuchsdauer, Teil II

Parameter	Ca^{2+}	Ca^{2+}	Ca^{2+}	Mg^{2+}	Mg^{2+}	Mg^{2+}	NH_4^+	NH_4^+	K^+	K^+	K^+	Cl^-	Cl^-	Cl^-	Na^{2+}	Na^{2+}	Na^{2+}	Al^{3+}	Al^{3+}	Al^{3+}
Zeitpunkt[1)]	0d	184d	570d	0d	184d	570d	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d	0d	184d	570d
Bezeichnung	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
W13	63.5	117	171	3.5	15	19.5	<0.0125	0.02	85	87	63	38.87	29.25	26.45	14.5	9.5	7	0.13	0.169	0.59
W14	63.5	79	103	3.5	14	16	<0.0125	<0.0125	85	56	105	38.87	26.46	28.01	14.5	7.5	6.5	0.13	0.151	0.75
W15	63.5	97	132	3.5	17	20.5	<0.0125	<0.0125	85	106	230	38.87	38.87	25.92	14.5	14	7.5	0.13	0.155	0.37
W3	63.5	95	133	3.5	14	16	<0.0125	<0.0125	80	104	235	38.06	25.77	26.25	14.5	9	6	0.076	0.12	1.08
W4	63.5	72	101	3.5	8.5	9.5	<0.0125	0.01	80	59	101	38.06	34.18	30.4	14.5	11	7	0.076	0.031	0.18
W16	63.5	110	116	3.5	15.5	15.25	<0.0125	0.06	83	70	125	37.56	26.31	27.38	14.5	8	6.5	0.076	1.98	9.6
W17	63.5	110	119	3.5	13.5	13	<0.0125	<0.0125	83	68	155	37.56	25.24	24.81	14.5	8	6	0.076	1.67	12
W18	63.5	70	86	3.5	6.5	7	<0.0125	<0.0125	83	66	62	37.56	30.41	30.24	14.5	9	9	0.076	0.024	0.81
W9	33	35	127	2.5	3.5	13.5	<0.0125	<0.0125	83	52	260	15.55	6.98	6.92	11	9	5.5	0.067	0.03	0.05
W10	33	59	96	2.5	7	10	<0.0125	<0.0125	11	6	130	15.55	11.44	10.1	11	6	5	0.067	0.042	0.79
W1	33	61	92.5	2.5	7.5	10.5	<0.0125	<0.0125	84	59	130	12.25	12.91	11.73	11	7.5	7.5	0.085	0.017	0.25
W2	33	71	106	2.5	5	6	<0.0125	<0.0125	84	49	100	12.25	8.38	8.13	11	9.5	6.5	0.085	0.019	0.03
W11	33	62	V.a.	2.5	8.5	V.a.	<0.0125	V.a.	83	8.3	V.a.	15.55	13.99	V.a.	11	11	V.a.	0.067	0.013	V.a.
W12	33	55	V.a.	2.5	7.5	V.a.	<0.0125	V.a.	83	25	V.a.	15.55	14.38	V.a.	11	8	V.a.	0.067	0.013	V.a.
W5	63.5	58	V.a.	3.5	13	V.a.	<0.0125	V.a.	80	41	V.a.	38.46	30.6	V.a.	14.5	8	V.a.	0.106	0.04	V.a.
W6	63.5	58	V.a.	3.5	10.5	V.a.	<0.0125	V.a.	80	41	V.a.	38.46	31.65	V.a.	14.5	10	V.a.	0.106	0.005	V.a.
W19	63.5	97	136	3.5	3.5	4.5	<0.0125	0.02	83	35	52	26.19	24.88	28.3	14.5	10	11	0.168	0.012	0.07
W22	63.5	84	87	3.5	8	8	<0.0125	<0.0125	84	31	34	27.06	29.96	29	14.5	9	9.3	0.298	0.017	0.08
W20	63.5	160	170	3.5	10	10	<0.0125	<0.0125	83	84	120	26.19	26.72	27.9	14.5	11.5	9	0.168	0.24	0.02
W21	63.5	134	162	3.5	6	6.5	<0.0125	<0.0125	83	85	138	26.19	25.21	28.39	14.5	14	10.5	0.168	0.012	0.07
W23	63.5	145	152	3.5	12	5	<0.0125	<0.0125	84	47	58	27.06	26.52	26	14.5	8	7.8	0.298	0.037	0.06
W7	63.5	109	148	3.5	4	5	0.22	<0.0125	80	31	80	38.46	28.41	28.18	14.5	8.5	7.5	0.106	0.034	0.1
W8	63.5	135	173	3.5	4	4.5	<0.0125	<0.0125	80	41	47	38.46	27.83	27.11	14.5	7.5	6	0.106	0.006	0.07

Legende V.a. : Versuch aufgelöst Eh : Redoxpotential n.n. : nicht nachweisbar Lf : elektrische Leitfähigkeit

[1)] Zeitpunkt der Probenahme nach Versuchsbeginn in Tagen

Tabelle A2-20: Ausgewählte Parameter der Batchversuche Sulingen

Parameter	O_2	O_2	Eh	Eh	Eh	pH	pH	pH	Lf	Lf	Lf	HCO_3^-	HCO_3^-	HCO_3^-	Mn_{ges}	Mn_{ges}	Mn_{ges}	Fe_{ges}	Fe_{ges}	Fe_{ges}
Zeitpunkt[1)]	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d
Bezeichnung	[mg/l]	[mg/l]	[mV]	[mV]	[mV]	[--]	[--]	[--]	[mS/cm]	[mS/cm]	[mS/cm]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
128_1	4.4	---	180	100	---	6.3	5.2	---	490	455	---	9.15	2.8	---	0.12	< 0,1	---	1.24	< 0,2	---
128_2 (30m)	---	1.35	190	---	355	8.2	---	5.1	480	---	998	72.59	---	5.2	0.11	---	0.3	< 0,2	---	0.35
123_1	4.5	---	210	243	---	6.3	5.2	---	440	457	---	7.03	3.3	---	0.12	< 0,1	---	1.24	< 0,2	---
123_2 (30m)	---	1.64	190	---	404	7.2	---	4.08	430	---	855	14.95	---	---	0.12	---	0.68	< 0,2	---	0.3

Parameter	Ca^{2+}	Ca^{2+}	Ca^{2+}	Mg^{2+}	Mg^{2+}	Mg^{2+}	NH_4^+	NH_4^+	K^+	K^+	K^+	Cl^-	Cl^-	Cl^-	Na^{2+}	Na^{2+}	Na^{2+}	Al^{3+}	Al^{3+}	Al^{3+}
Zeitpunkt[1)]	0d	336d	483d	0d	336d	483d	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d	0d	336d	483d
Bezeichnung	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	mg/l	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
128_1	11.5	24	---	1.5	9	---	0.02	---	81	38	---	30	30	---	17.5	13	---	0.005	0.05	---
128_2 (30m)	32	---	75	14	---	19	---	---	85	---	65	30	---	70	26	---	57	0.005	---	0.3
123_1	11.5	40	---	1.5	6	---	0,012	---	81	22	---	35	35	---	17.5	15	---	0.005	0.04	---
123_2 (30m)	10	---	66	1.5	---	20	---	---	84	---	68	35	---	27	17	---	35	0.005	---	3

Legende Eh : Redoxpotential n.n. : nicht nachweisbar Lf : elektrische Leitfähigkeit

[1)] Zeitpunkt der Probenahme nach Versuchsbeginn in Tagen

Tabelle A2-21: Raten der Elimination von Nitrat -R_E

Versuchsdauer	2	7	21	84	184	275	365	570	[d]
Bezeichnung									
W13	0,453	0,097	0,210	0,279	0,085	0,338	0,536	0,486	
W14	0,398	0,192	0,073	0,107	0,173	0,091	0,139	0,214	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W15	0,903	0,137	0,108	0,157	0,171	0,339	0,484	0,504	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W3	1,765	0,210	0,060	0,104	0,216	0,335	0,467	0,438	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W4	1,575	0,226	0,058	0,049	0,048	0,088	0,061	0,076	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W16	0,093	0,226	0,045	0,046	0,084	0,188	0,227	0,105	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W17	0,595	0,467	0,121	0,065	0,116	0,117	0,260	0,394	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W18	0,465	0,115	0,027	0,022	0,062	0,049	0,035	0,041	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W9	0,388	0,157	0,031	0,323	0,102	0,462	0,437	0,748	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W10	0,390	0,069	0,028	0,010	0,010	0,037	0,105	0,115	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W1	0,868	0,148	0,007	0,040	0,024	0,079	0,081	0,088	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W2	0,367	0,259	0,094	0,056	0,076	0,078	0,074	0,048	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W11	0,102	-0,04	0,043	0,000	0,003	0,002	0,005		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W12	0,138	-0,01	0,008	0,005	0,007	0,001	0,006		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W5	0,772	0,031	0,036	0,002	-2E-3	0,002	0,005		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W6	0,333	0,055	0,070	0,003	-4E-3	-6E-3	0,010		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W19	0,611	0,105	0,824	0,415	0,554	0,330	0,057	-0,01	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W22	0,368	-5E-3	0,005	0,004	0,004	0,028	-4E-3	-1E-3	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W20	1,763	0,237	2,134	0,054	0,954	0,417	0,325	0,299	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W21	0,588	0,313	2,483	0,032	0,987	0,418	0,108	0,413	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W23	0,406	0,105	0,278	0,158	-0,04	0,016	-0,05	0,001	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W7	0,823	0,094	0,334	0,103	0,044	0,060	0,056	0,040	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W8	0,893	0,096	0,147	0,041	0,020	0,031	0,054	0,041	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$

Tabelle A2-22: Raten der Denitrifikation R_D

Versuchsdauer	2	7	21	84	184	275	365	570	[d]
Bezeichnung									
W13	0,106	0,047	0,096	0,205	0,066	0,135	0,570	0,352	
W14	0,087	0,038	0,037	0,079	0,140	-0,03	0,181	0,064	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W15	0,132	0,079	0,064	0,114	0,136	0,124	0,516	0,385	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W3	0,280	0,037	0,038	0,072	0,169	0,076	0,537	0,298	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W4	0,059	0,028	0,039	0,032	0,050	-2E-3	0,091	0,055	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W16	0,135	0,054	0,060	0,029	0,063	0,127	0,182	0,030	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W17	0,260	0,169	0,099	0,053	0,075	0,023	0,227	0,079	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W18	0,076	0,038	0,036	0,023	0,038	0,030	0,016	0,033	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W9	0,101	0,022	0,022	0,248	0,082	0,250	0,402		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W10	0,055	0,014	0,011	0,008	0,008	0,027	0,063	0,059	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W1	0,027	0,006	0,009	0,023	0,029	0,033	0,051	0,049	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W2	0,091	0,033	0,042	0,030	0,021	0,091	0,030	0,030	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W11	0,026	0,002	0,002	0,001	-2E-3	0,006	-0,01		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W12	0,027	0,004	0,004	0,004	-1E-3	0,001	-0,01		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W5	0,015	0,147	0,070	0,020	-0,03	0,015	-0,02		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W6	0,014	0,144	0,067	0,021	-0,03	0,011	-0,02		$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W19	0,322	0,042	0,298	0,343	0,351	0,277	0,080	0,056	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W22	0,030	0,010	0,010	0,002	0,005	-0,01	0,011	0,003	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W20	0,155	0,130	1,186	0,134	0,960	0,397	0,176	0,236	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W21	0,151	0,164	0,948	0,200	1,023	-1,43	1,915	0,260	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W23	0,386	0,118	0,238	0,126	-0,05	-0,09	0,088	0,011	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W7	0,078	0,356	0,129	0,070	0,029	0,025	0,035	0,022	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$
W8	0,019	0,135	0,071	0,035	0,004	0,013	0,021	0,016	$[mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}]N$

Tabelle A2-23: Anteile an der Nitratelimination nach 184d Versuchsdauer[+]

Versuch	E(184d)	N_2	N_2O	NO_2^-	eluiert	sorbiert[(1)]	Rest[(2)]	
W13	-29,92	21,48	0,05	0,00	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	71,78	0,16	0,00	0,00		28,06	**[%]**
W14	-26,43	20,08	0,04	0,00	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	75,97	0,16	0,00	0,00		23,87	**[%]**
W15	-30,05	22,56	0,06	0,00	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	75,06	0,20	0,00	0,00		24,73	**[%]**
W3	-31,74	22,50	0,04	0,00	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	70,88	0,13	0,00	0,00		28,99	**[%]**
W4	-11,39	7,96	0,05	0,00	0,00	0,35		**[mgkg^{-1}]N**
	100	69,93	0,44	0,00	0,00	3,09	26,54	**[%]**
W16	-13,20	2,30	7,35	0,00	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	17,40	55,72	0,00	0,00		26,88	**[%]**
W17	-20,31	7,49	6,48	0,00	0,00	0,23		**[mgkg^{-1}]N**
	100	36,87	31,89	0,00	0,00	1,15	30,09	**[%]**
W18	-8,97	6,20	0,12	0,00	0,71			**[mgkg^{-1}]N**
	100	69,19	1,34	0,00	7,92		21,55	**[%]**
W9	-32,11	24,61	0,02	0,00	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	76,63	0,06	0,00	0,00		23,32	**[%]**
W10	-2,71	1,79	0,02	0,00	0,64	0,20		**[mgkg^{-1}]N**
	100	65,89	0,63	0,18	23,62	7,45	2,23	**[%]**
W1	-6,62	4,43	0,07	0,00	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	66,84	1,01	0,00	0,00		32,15	**[%]**
W2	-14,10	4,41	0,51	0,01	0,00	0,73		**[mgkg^{-1}]N**
	100	31,26	3,63	0,08	0,00	5,19	59,84	**[%]**
W11	-0,78	0,10	0,05	0,00	4,48			**[mgkg^{-1}]N**
	100	13,11	5,79	0,00	>80		0,00	**[%]**
W12	-1,20	0,27	0,19	0,00	0,32	0,04		**[mgkg^{-1}]N**
	100	22,40	15,80	0,00	26,56	3,60	31,64	**[%]**
W5	-1,34	0,13	0,01	0,63	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	9,72	0,72	47,04	0,00		42,52	**[%]**
W6	-1,42	0,10	0,01	0,62	0,23	0,06		**[mgkg^{-1}]N**
	100	7,17	1,05	43,54	16,20	4,15	27,88	**[%]**
W19	-94,25	56,10	0,22	5,60	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	59,52	0,24	5,94	0,00		34,30	**[%]**
W22	-1,10	0,83	0,01	0,14	1,82			**[mgkg^{-1}]N**
	100	75,87	0,74	12,47	>10		0,00	**[%]**
W20	-131,55	96,87	17,47	8,12	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	73,63	13,28	6,18	0,00		6,91	**[%]**
W21	-137,61	120,61	1,65	7,57	0,00			**[mgkg^{-1}]N**
	100	87,64	1,20	5,50	0,00		5,65	**[%]**
W23	-11,13	2,68	2,37	2,70	0,31	0,33		**[mgkg^{-1}]N**
	100	24,11	21,28	24,25	2,79	2,97	24,59	**[%]**
W7	-16,82	7,10	1,42	3,36	0,48			**[mgkg^{-1}]N**
	100	42,22	8,46	19,97	2,85		26,50	**[%]**
W8	-8,00	1,01	3,18	0,56	0,50	0,21		**[mgkg^{-1}]N**
	100	12,61	39,76	7,00	6,25	2,68	31,70	**[%]**

[(1)] Mittelwerte nach Tabelle A2-24, [(2)]Anteil der Nitratelimination, der weder durch Denitrifikation noch durch Sorption (reversibel und irreversibel) abgedeckt wird, [+]Die jeweils 2. Zeile enthält den Anteil [%] an der Nitratelimination, durch Rundungen können Abweichungen von ± 2% bzgl. 100% auftreten.

Tabelle A2-24: Irreversible sorbierte Nitrat-Masse ($M_{Sorption}$) an je 2 Parallelproben A & B

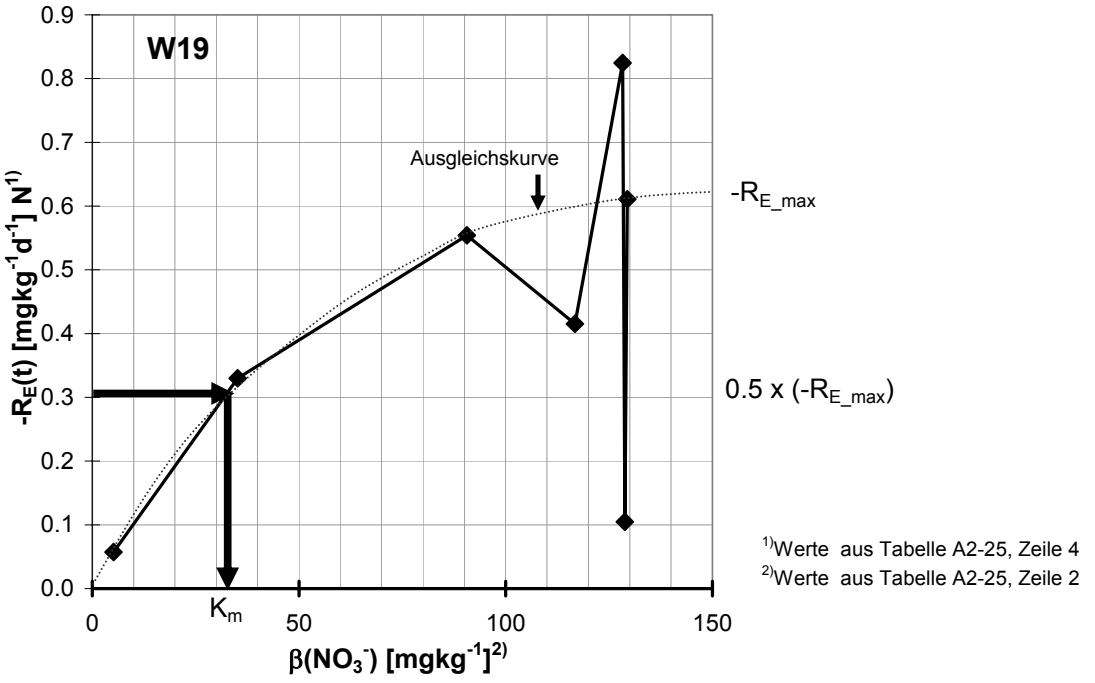
Proben	W2**	W4*	W6***	W8***	W10**	W12**	W17*	W23***	
$M_{Sorption}$(A)	0,85	0,43	0,07	0,25	0,21	0,05	0,33	0,34	**[mgkg^{-1}]N**
$M_{Sorption}$(B)	0,61	0,28	0,04	0,18	0,19	0,04	0,13	0,32	**[mgkg^{-1}]N**
Mittelwert	0,73	0,35	0,06	0,21	0,20	0,04	0,23	0,33	**[mgkg^{-1}]N**
Standard-abweichung	0,17	0,11	0,02	0,05	0,01	0,01	0,14	0,01	**[mgkg^{-1}]N**

*Bohrung Wehnsen *W2123, **W2122, ***W2113

Tabelle A2-25: Daten von Versuch W19 für die Anpassung der Michaelis-Menten-Kinetik

Versuchs-dauer	0	2	7	21	84	184	275	[d]
$\beta_{gemessen}$	129,4	128,8	128,3	116,8	90,6	35,2	5,2	**[mg·kg^{-1}]**
E(t)$^{2)}$		-0,61	-1,13	-12,7	-38,8	-94,3	-124,3	**[mg·kg^{-1}]**
$-R_E(t)$		0,61	0,10	0,82	0,42	0,55	0,33	**[mg·kg^{-1}·d^{-1}]**
$\beta_{berechnet}$ $^{1)}$		128,4	125,9	119	89,2	47,4	19,5	**[mg·kg^{-1}]**

$^{1)}$entsprechend Gleichung (4 – 15), dargestellt auch in Abbildung A2-4, $^{2)}$Tabelle A2-13, Blatt 2-20 & 2-21



Für den Versuch W19 wird die Rate $R_E(t)$ über der Konzentration β(t) aufgetragen. Aus der Ausgleichskurve werden die Werte:

$-R_{E\_max}$ = 0,62 mg·kg^{-1}·d^{-1}, entsprechend der Ausgleichskurve

K_m = 32 mg·kg^{-1} abgelesen.

Die Gleichung (4-15) ergibt sich somit zu:

Die Lösung erfolgt

$$0{,}62[mgkg^{-1}d^{-1}]\cdot t[d] = 129{,}4[mgkg^{-1}] - \beta[mgkg^{-1}] + 32[mgkg^{-1}]\ln\left(\frac{129{,}4}{\beta}\right)$$

iterativ.

Abbildung A2-4: Anpassung der Michaelis-Menten-Kinetik für Versuch W19

Tabelle A2-26: Umsatzkennwerte λ (Elimination) nach einer Reaktion 0. und 1. Ordnung

Ver-such[a]	Ge-stein[b]	Typ	$T_{1/2}$[c]	β_o	0. Ordnung			1. Ordnung		
					λ_o	MAE	NRMS	λ_1	MAE	NRMS
			[a^{-1}]	[$mg \cdot kg^{-1}$]N	[$mgkg^{-1}d^{-1}$]N	[$mgkg^{-1}$]N	[%]	[a^{-1}]	[$mg \cdot kg^{-1}$]N	[%]
W1	fS	I	0,35	27,1	0,056	1,2	3,5	1,83	4,4	9,3
W2	fS	I	0,14	26,0	0,074	0,36	0,6	5,11	10,5	18,9
W3	fS	III	0,05	27,3	0,164	1,99	4,6	14,97	4,4	28,2
W4	fS	I	0,25	27,3	0,065	0,83	1,6	2,92	4,7	8,3
W5	*mS*	II	18,99	25,6	0,002	0,2	7,2	0,04	0,4	47,0
W6	*mS*	II	27,13	25,8	0,002	0,45	14,9	0,03	0,53	30,4
W7	mS	II	0,12	24,6	0,086	2,0	4,0	5,84	2,4	5,4
W8	mS	II	0,76	24,6	0,043	1,1	3,7	1,10	1,2	3,6
W9	fS	III	0,04	28,2	0,220	1,82	3,5	16,79	10,9	23,4
W10	mS	III	0,39	26,1	0,051	2,16	6,3	1,83	5,7	12,3
W11	*gS*	II	18,99	24,5	0,003	0,12	4,1	0,04	0,21	8,2
W12	*gS*	II	9,50	24,4	0,005	0,07	2,2	0,07	0,07	2,2
W13	fS	III	0,04	26,6	0,202	1,67	3,5	16,79	5,05	11,5
W14	fS	III	0,12	27,4	0,140	0,96	2,1	5,84	3,75	9,6
W15	fS	III	0,05	26,6	0,160	0,52	1,0	14,60	6,1	14,1
W16	mS	III	0,09	26,5	0,096	2,0	4,2	7,30	6,7	14,2
W17	fS	III	0,09	26,2	0,102	0,8	1,4	8,03	4,2	10,0
W18	mS	III	0,44	26,0	0,044	0,4	1,5	1,46	3,3	7,0
W19	uT	II	0,02	31,5	0,500	13,5	24,7	40,15	20,7	39,7
W20	U	II	0,01	30,5	1,145	4,6	16,1	131,40	12,7	33,3
W21	U	II	0,01	31,2	1,470	4,7	11,2	135,05	14,2	33,8
W22	*U*	*I*	*4,75*	*26,4*	*0,009*	*0,36*	*5,8*	*0,15*	*0,4*	*5,6*
W23	*mS*	*II*	*0,95*	*24,6*	*0,037*	*3,9*	*14,7*	*0,73*	*3,5*	*4,6*
S128_2	*fS*	*II*		*25,0*	*0,014*	*0,46*	*4,3*	*0,29*	*0,58*	*4,8*
S123_1	*fS*	*II*		*25,5*	*0,011*	*0,35*	*3,7*	*0,18*	*0,89*	*7,1*
S123_2	*fS*	*II*		*24,5*	*0,023*	*0,6*	*3,1*	*0,511*	*0,86*	*4,2*

[a]Versuche mit unbedeutender Denitrifikation sind kursiv gedruckt, [b]Hauptkomponente, [c]aus λ_1, [d][$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$], β_o … Nitratkonzentration zu Versuchsbeginn

hydraulisch passive Bereiche ($K<10^{-6} m \cdot s^{-1}$) sind grau hinterlegt

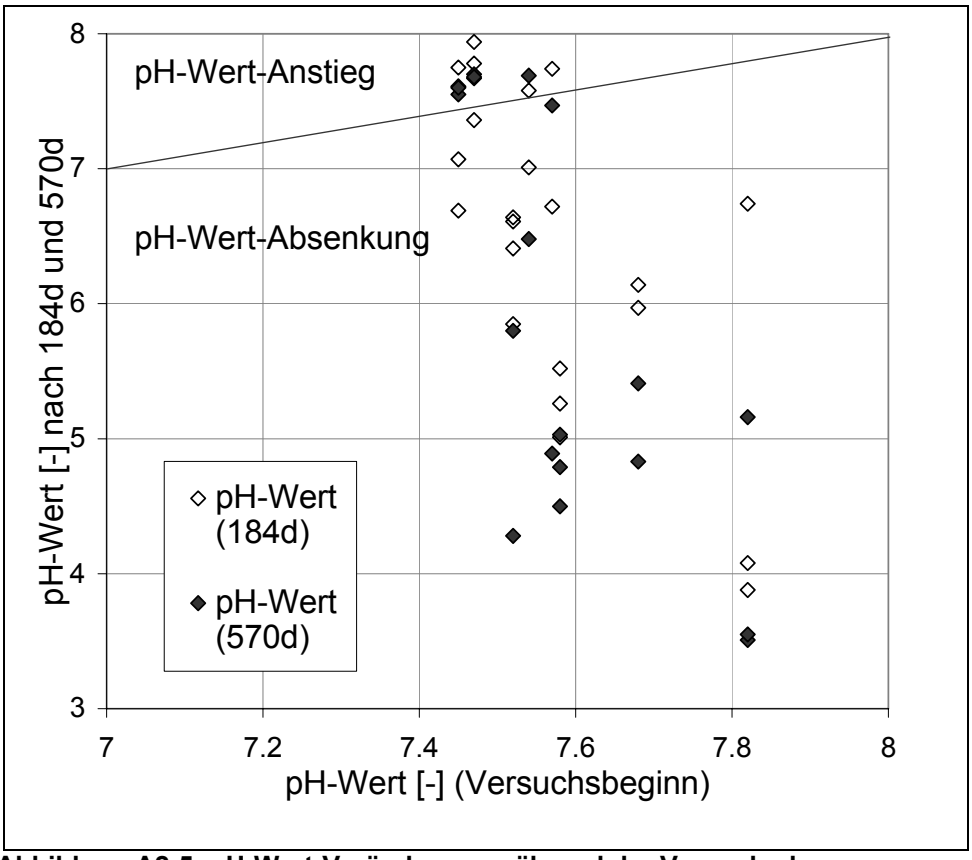
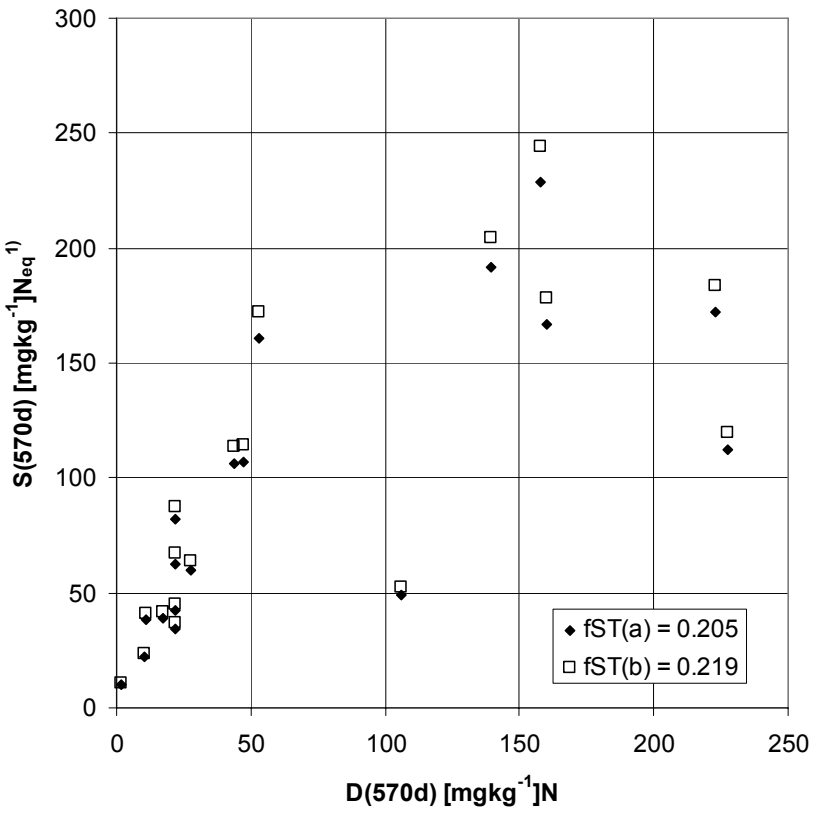


Abbildung A2-5: pH-Wert-Veränderung während der Versuchsdauer

Tabelle A2-27: Regressionsgleichungen von Nitratumsatz und Gehalten an Reduktionsmitteln

Parameter	n[(a)]	r_S[(b)]	Gleichung	MAE[(c)]
E(t), t=365d	[-]	[-]	E(365d)[mg·kg^{-1}] =	[mg·kg^{-1}]
. . . TOC	23	-0,44	-256,5·(TOC)[%]	34,1
. . . Sulfid-S	23	-0,76	-327,6·(S_2^{2-})[%]	29,6
. . . Glühverl.	22	-0,77	-59,6·(Glühverl.)[%]	32,2
D(t), t=184d	[-]	[-]	D(184d)[mg·kg^{-1}] =	[mg·kg^{-1}]
. . . TOC	23	0,46	120,8·(TOC)[%]	18,7
. . . Sulfid-S	23	0,69	158,5·(S_2^{2-})[%]	15,9
. . . Glühverl.	21	0,71	24,4·(Glühverl.)[%]	17,8
λ_o	[-]	[-]	λ_0[mg·kg^{-1}·d^{-1}] =	[mg·kg^{-1}·d^{-1}]
. . . TOC	23	-0,44	-1,15·(TOC)[%]	0,18
. . . Sulfid-S	23	-0,76	-1,63·(S_2^{2-})[%]	0,16
. . . Glühverl.	22	-0,37	-0,22·(Glühverl.)[%]	0,18
λ_1	[-]	[-]	λ_1[a^{-1}] =	[a^{-1}]
. . . TOC	23	-0,44	-115,89·(TOC)[%]	19,65
. . . Sulfid-S	23	-0,79	-149,18·(S_2^{2-})[%]	16,67
. . . Glühverl.	22	-0,35	-19,96·(Glühverl.)[%]	19,01

[(a)]n…Anzahl der Datenpaare, [(b)]r_s…Korrelationskoeffizient nach Spearman, [(c)]MAE…durchschnittlicher absoluter Fehler



[1)]Entsprechend der Stöchiometriefaktoren (f_{ST}) der chemo-lithotrophen Denitrifikation mit: $f_{ST(a)}$ = 0,205 (Teilschritt 1) und $f_{ST(b)}$= 0,219 (Teilschritte 1 & 2) aus der Sulfatproduktion bestimmt.

Abbildung A2-6: Denitrifikation und Sulfatproduktion nach 570 d Versuchsdauer

Tabelle A2-28: Kenndaten der Säulenversuche

Bezeichnung Bohrung		**2113**	**2122**	**2123**
Versuch		**S2113**	**S2122**	**S2123**
Teufe des Kernmaterials	m u GOK	42 - 44	34 - 36	42 - 44
Masse feuchtes Gestein	g	4825,3	4434,7	4215,0
Wassergehalt	%	7,0	18,39	24,56
Wasservolumen im Sediment	mL	315,7	688,9	831,1
Masse trockenes Gestein	g	4509,6	3745,8	3383,9
zugegebenes Wasser	ml	26,7	138,2	213,6
gesamtes Wasservolumen	ml	342,4	827,1	1045
gesamtes Säulenvolumen	ml	2200	2200	2200
Mittlerer Durchfluss ($\overline{Q}$)	$ml \cdot h^{-1}$	2,087	2,478	2,260
$\overline{v}_a$	$m \cdot d^{-1}$	0,08	0,04	0,03
n_{gesamt}	-	0,16	0,38	0,48
n_e	-	0,15	0,34	0,38
Gesamtlaufzeit t_{ges}	d	452,5	460,0	454
E_{gesamt} für t_{ges}	$mg \cdot kg^{-1}$ N	35,17	16,6	31,2
$\overline{\beta}_{NO3\_zulauf}$ nach Formel[1)]	$mg \cdot l^{-1}$ (NO_3^-)	54,41	49,15	51,9

1) $\overline{\beta}_{NO3\_Zulauf} = (\sum_{i=1}^{t}(\beta_{NO3\_Zulauf}(t) \cdot \Delta V)) / \sum_{i=1}^{t} V_i$

Tabelle A2-29a: Daten für Säulenversuch S2123

Versuchsdauer	ΣV	Zulauf	Zulauf	Zulauf	Ablauf	Ablauf	E(t)	Ablauf	Ablauf	Ablauf	Ablauf	Ablauf
	(Versuchslösung)	Nitrat	$\Sigma m(NO_3^-)$	Sulfat	Nitrat	$\Sigma m(NO_3^-)$		D(t)	pH	Eh	HCO_3	Sulfat
[d]	[ml]	[mg·l⁻¹]	[mg]	[mg·l⁻¹]	[mg·l⁻¹]	[mg]	[mg·kg⁻¹]N	[mg·l⁻¹]N	[--]	[V]	[mg·l⁻¹]	[mg·l⁻¹]
0	0	62.9		75.3	14.88		0.00					169.87
1	493	61.2	26	73.61	23.515714	12	-0.9	1.12				164.44
12	1343	59.6	70	70.66	36.048571	42	-1.8	0.32				124.58
15	1983	57.8	103	68.44	22.231429	56	-3.1	1.77				148.05
33	2726	56.1	141	71.5	6.1557143	61	-5.4	1.11				175.3
59	3605	53.9	187	75.13	9.1228571	69	-7.9	5.02				153.14
68	4636	51.9	241	75.44	12.621429	82	-10.6	10.86				127.16
76	5249	50.6	272	75.62	11.381429	89	-12.3	5.27				120.88
98	6290	50.6	326	76.06	9.3	99	-15.2	6.75				110.21
112	6943	51.4	360	76.33	14.215714	108	-16.9					103.45
126	7628	52.2	396	76.8	19.308571	121	-18.3	4.5	4.68	0.36	1.3	96.37
155	8969	54.1	465	77	31.531429	164	-20.2					94.38
189	10559	52.8	548	81.51	36.225714	221	-21.8					92.7
217	12184	50.1	632	78.16	36.27	280	-23.5		4.47	0.33	1.5	90.8
244	13654	49.2	709	78.47	39.015714	337	-24.8					89.54
278	15526	50.0	806	77.94	42.47	417	-26.0					87.35
308	17202	51.0	893	93.03	46.367143	495	-26.6		7.34	0.37	49	84.81
340	18971	51.4	985	78.57	46.588571	577	-27.2					83.9
369	20572	50.4	1068	79.54	46.544286	652	-27.8					81.89
400	22221	50.3	1153	80.33	47.651429	730	-28.3		4.27	0.34	0	82.15
431	23882	50.6	1239	80.41	46.898571	808	-28.8					89.9
454	25184	50.6	1307	80.41	46.367143	868	-29.3		7.19	0.39	66	86.69

.Tabelle A2-29b: Daten für Säulenversuch S2113

Versuchsdauer	ΣV	Zulauf	Zulauf	Zulauf	Ablauf	Ablauf	E(t)	Ablauf	Ablauf	Ablauf	Ablauf	Ablauf
	(Versuchslösu	Nitrat	$\Sigma m(NO_3^-)$	Sulfat	Nitrat	$\Sigma m(NO_3^-)$		D(t)	pH	Eh	HCO_3	Sulfat
[d]	[ml]	[mg·l⁻¹]	[mg]	[mg·l⁻¹]	[mg·l⁻¹]	[mg]	[mg·kg⁻¹]N	[mg·l⁻¹]N	[--]	[V]	[mg·l⁻¹]	[mg·l⁻¹]
0	0	57.9		126.38	57.8		0.00					
5.2	850.7	56.4	46		36.42	31	-0.8					140.4
13	1324.7	58.4	72	122.23	31.3	46	-1.3	6.31				
43.9	3467.7	59.3	189	127.47	11.2	70	-5.9					145.4
49	3777.2	58.3	205		33.15	80	-6.3	41.39				140.4
79	5322.3	56.9	290	90.76	34.25	133	-7.8	32.72				147.4
114	6401	55.8	348	82.05	15.46	150	-9.9					119.3
124.5	6721	56.2	366	79.5	9.89	153	-10.7	10.51	7.47	0.21	143	110.9
153.5	8181.35	55.3	445	84.27	18.51	180	-13.3	7.87				103.1
187.5	9902.65	54.4	539	84.27	22.15	218	-16.1	7.93				103.4
214.5	11281.15	53.6	614	82.66	20.62	246	-18.4		7.66	0.18	74	100.64
241.5	12378.75	52.6	673	80	23.27	272	-20.1					108.75
275.5	14058.65	52.3	765	80	24.79	314	-22.6					105.34
305.5	15571.15	52.8	847	81	24.56	351	-24.8		7.51	0.22	101	105.4
337.5	17281.65	53.6	940	81	25.24	394	-27.3					104.2
367.5	18837.65	52.3	1025	81	27.91	437	-29.4					101.42
398.5	20446.65	52.5	1112	81	34.28	493	-31.0		7.63	0.20	84	99.53
429.5	21397.65	52.4	1164	81	35.59	526	-31.9					99.07
452.5	23327.65	52.4	1269	81	36.2	596	-33.7		7.76	0.18	105	98.24

Tabelle A2-29c: Daten für Säulenversuch S2122

Versuchsdauer	ΣV	Zulauf	Zulauf	Zulauf	Ablauf	Ablauf	E(t)	Ablauf	Ablauf	Ablauf	Ablauf	Ablauf
	(Versuchslösu	Nitrat	$\Sigma m(NO_3^-)$	Sulfat	Nitrat	$\Sigma m(NO_3^-)$		D(t)	pH	Eh	HCO_3	Sulfat
[d]	[ml]	[mg·l⁻¹]	[mg]	[mg·l⁻¹]	[mg·l⁻¹]	[mg]	[mg·kg⁻¹]N	[mg·l⁻¹]N	[--]	[V]	[mg·l⁻¹]	[mg·l⁻¹]
0	0	51.37					0.00					
0.1	15		1			0	0.0	0.1				50.5
1.2	525		26		59.6	30	0.3	1.14				26.7
6.2	1694	51.37	83	38.64		30		0.32				
8.2	1953	51.37	96		42.6	41	-3.3	0.9				29.33
10.8	2059	51.37	101	26.68	53.5	47	-3.3					31.45
33.2	3775	49.60	186	21.92	50.2	133	-3.1	1.74				32.45
41	4835	51.37	238	21.92	46.3	182	-3.3	1.23				32.79
46	5123	49.60	252	24.12	43.0	195	-3.4	2.68				31
76	6445	49.16	317	25.3	40.6	248	-4.1	2.35				30.14
106	7938	50.93	390	25.86	38.7	306	-5.1	3.03				28.53
107.8	8091	51.37	398	25.71	38.8	312	-5.2	2.32				28.87
117	8841	51.37	435	25.71	39.0	341	-5.6	3.02				38.87
132	9458	51.81	465	26	39.4	366	-6.0		7.85	0.156	83	28.87
161	11036	52.26	542	26.4	40.8	430	-6.8					30.69
195	12935	50.49	636	28.43	39.3	505	-7.9					30.01
223	14510	50.04	713	27.5	39.0	566	-8.9		7.52	0.24	70	30.19
250	15872	50.49	780	27.52	39.2	619	-9.7					31.25
284	18271	49.60	898	27.5	34.1	701	-11.8					32.45
314	20112	50.93	989	27.36	42.4	779	-12.6		7.46	0.252	79	32.06
346	22035	50.93	1083	27.19	41.6	859	-13.5					29.92
375	23727	50.04	1166	27.2	36.8	922	-14.7					32.07
406	25405	50.04	1249	27.2	42.1	992	-15.4		7.52	0.227	80	31.79
437	27664	50.49	1360	27.3	46.5	1097	-15.8					32.04
460	28955	50.49	1423	27.3	38.8	1148	-16.6		7.59	0.219	81	32.1

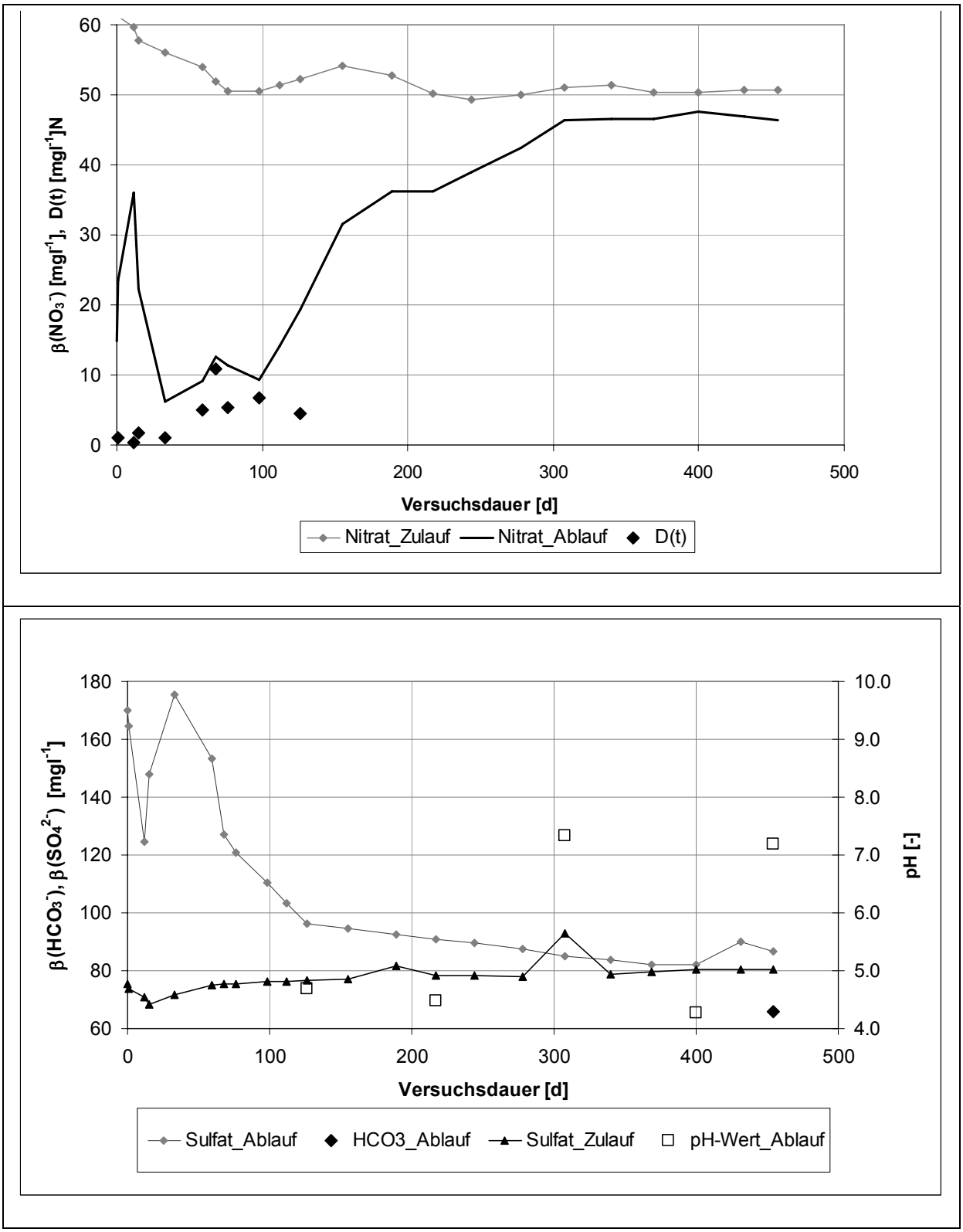


Abbildung A2-7: Ergebnisse des Säulenversuchs S2123

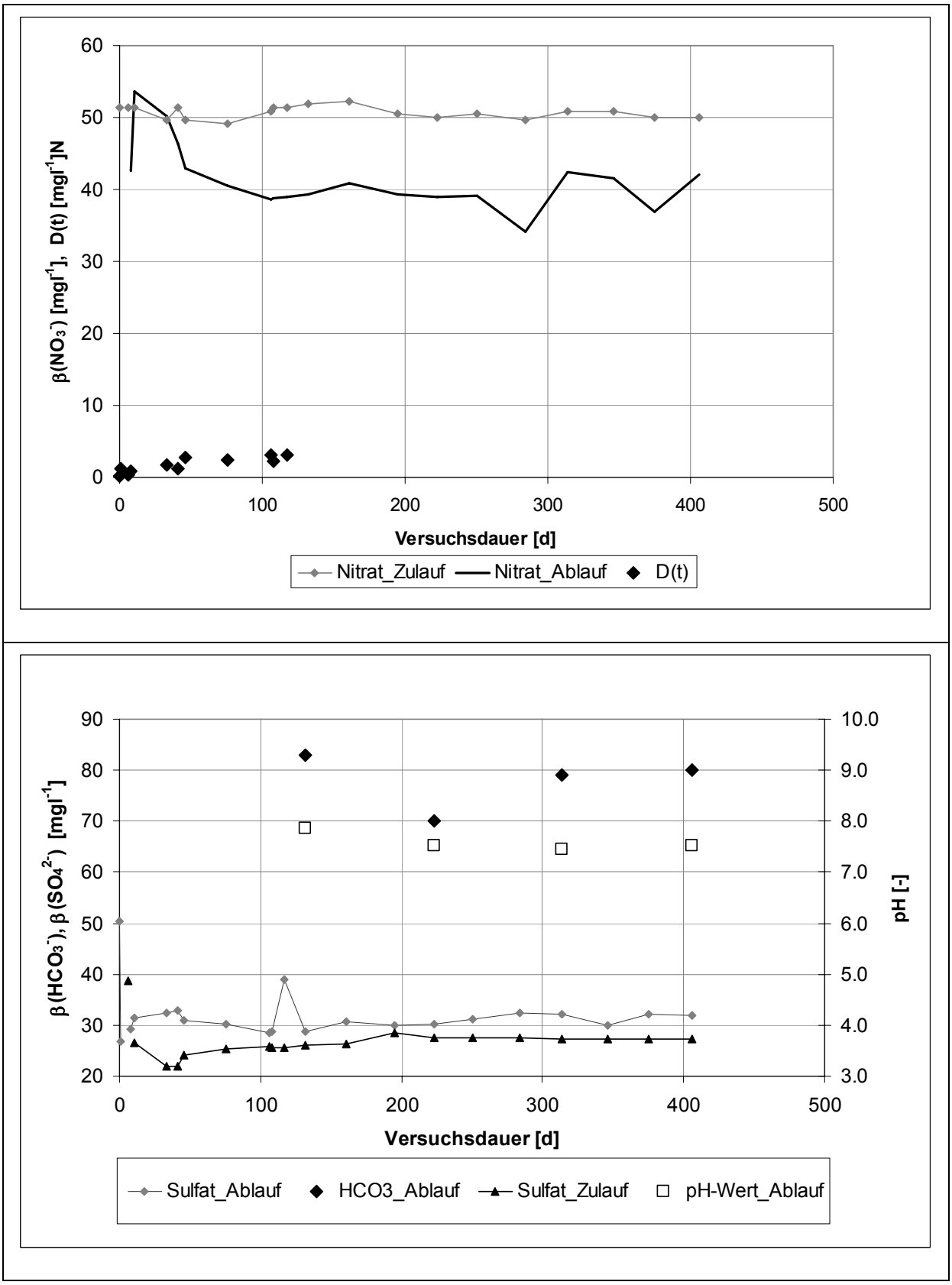


Abbildung A2-8: Ergebnisse des Säulenversuchs S2122

Tabelle A2-30: Korrelationskoeffizienten r_s von D(t) bzw. E(t)

	-E(2d)	-E(7d)	-E(21d)	-E(184d)	-E(365d)	-E(570d)	
D(2d)		.68**	.58**	.45*	.42*	$.23_{19}$	-E(2d)
D(7d)	.57**		.68**	.69**	.69**	$.44_{19}$	-E(7d)
D(21d)	.64**	.95**		.79**	.72**	$.39_{19}$	-E(21d)
D(184d)	.77**	.45*	.56**		.96**	$.86_{19}$**	-E(184d)
D(365d)	$.59_{19}$**	$.36_{19}$	$.52_{19}$*	$.94_{19}$**		$.92_{19}$**	-E(365d)
D(570d)	$.51_{18}$*	$.27_{18}$	$.44_{18}$	$.88_{18}$*	$.95_{18}$**		-E(570d)
	D(2d)	D(7d)	D(21d)	D(184d)	D(365d)	D(570d)	

Tiefgestellte Ziffer: Anzahl der Datenpaare n, wenn n ≠ 23,
*Signifikanzniveau: 0,05, ** Signifikanzniveau: 0,01

Tabelle A2-31: Korrelationskoeffizienten r_s von E(t) mit ausgewählten Parametern

E(t)	$D(t)^+$	$-X(t)^+$	$S(t)^+$	$CO_2(t)^+$	K_{Kern}	TOC	S_2^{2-}	$(N_2O/D)(t)^+$	$(N_2O/D)(t)^+$
-E(2d)	.19	.73**	-.35	-.04	$-.24_{22}$	.39	.33	-.06	-.30
-E(7d)	.31	.77**	-.04	$.11_{17}$	$-.34_{22}$	.68**	.60**	-.25	-.67**
-E(21d)	.79**	.77**	.51*	$-.19_{16}$	$-.41_{22}$	.37	.68**	.28	-.12
-E(184d)	.98**	.67**	.84**	-.04	$-.60_{22}$**	.40	.72**	-.18	-.42*
-E(365d)	$.99_{19}$**	.92**	.89**	$-.22_{19}$	$-.65_{22}$**	.44*	.76**	$.03_{19}$	$-.12_{19}$
-E(570d)	$.99_{18}$**	$.88_{19}$**	$.91_{19}$**	--	$-.51_{18}$*	$.25_{19}$	$.52_{19}$*	$.18_{18}$	$-.03_{18}$
D(2d)		.39	-.01	$.18_{16}$	$-.49_{22}$*	.34	.37	.32	.57**
D(7d)		-.27	.68**	$-.29_{17}$	$-.19_{22}$	.09	.32	.53**	.13
D(21d)		.32	.60**	$-.45_{16}$	$-.30_{22}$	.06	.35	.63**	-.29
D(184d)		.61**	.87**	$.02_{23}$	$-.65_{22}$**	.46*	.69**	-.19	-.44*
D(365d)		$.86_{19}$**	$.84_{19}$**	$-.22_{16}$	$-.60_{18}$**	.19	$.54_{19}$*	$-.04_{19}$	$-.13_{19}$
D(570d)		$.86_{18}$**	$.87_{18}$**	--	$-.53_{17}$*	$.26_{18}$	$.45_{18}$	$.17_{18}$	$-.10_{18}$

Tiefgestellte Ziffer: Anzahl der Datenpaare n, wenn n ≠ 23, *Signifikanzniveau: 0,05, ** Signifikanzniveau: 0,01, $^+$(t) ist der Zeitpunkt jeweils korrespondierende Zeitpunkt gegenüber –E(t) und D(t), das heißt D(t) nimmt dabei die Werte für die Zeitpunkte 2d bis 570d nach Versuchsbeginn gemäß der 1. Spalte an

Tabelle A2-32: Ausgewählte Korrelationskoeffizienten r_s

	$-E(t)^+$	$D(t)^+$	$-X(t)^+$	$S(t)^+$	$CO_2(t)^+$	TOC	S_2^{2-}	$(N_2O/D)(t)^+$	$(N_2O/D)(t)^+$
$\Delta\beta_{Al3+}$(184d)	.33	.32	.37	.54**	.63**	.38	.18	-.68**	-.15
$\Delta\beta_{Al3+}$(570d)	$.17_{19}$	$.18_{18}$	$.53_{18}$*	$.43_{19}$		$.09_{19}$	$-.03_{19}$	$-.55_{18}$*	$.43_{18}$
ΔpH(184d)	.03	-.04	-.14	-.25	-.87**	-.15	.12	.72**	.30
ΔpH(570d)	$.05_{19}$	$-.01_{18}$	$-.42_{18}$	$-.38_{19}$		$-.07_{19}$	$.18_{19}$	$.56_{18}$*	$-.49_{18}$*
$\Delta\beta_{HCO3}$(184d)	$-.14_{20}$	$-.19_{20}$	$-.07_{20}$	$-.42_{20}$	$-.86_{20}$**	$-.13_{20}$	$.01_{20}$	$.66_{20}$**	$.79_{20}$**
$\Delta\beta_{HCO3}$(570d)	$-.22_{19}$	$-.20_{15}$	$-.47_{15}$	$-.53_{16}$*		$-.03_{16}$	$.24_{19}$	$.52_{15}$*	$-.31_{15}$
$\Delta\beta_{Mn}$(184d)	-.03	-.07	.16	.19	.35	.31	$.09_{23}$	-.43*	.40
$\Delta\beta_{Mn}$(570d)	$.04_{19}$	$.14_{18}$	$.41_{18}$	$.26_{19}$		$.09_{19}$	$.24_{19}$	$-.74_{18}$**	$.24_{18}$
$\Delta\beta_{Eh}$(184d)	.03	.10	.04	.28	.84**	.23	-.06	-.67**	-.32
$\Delta\beta_{Eh}$(570d)	$.04_{19}$	$.01_{18}$	$.40_{18}$	$.30_{19}$		.18	$-.30_{19}$	$-.56_{18}$**	$.45_{18}$

Tiefgestellte Ziffer: Anzahl der Datenpaare n, wenn n ≠ 23, *Signifikanzniveau: 0,05, ** Signifikanzniveau: 0,01, $^+$(t)) ist der Zeitpunkt jeweils korrespondierende Zeitpunkt gegenüber –E(t) und D(t), das heißt D(t) nimmt dabei die Werte für die Zeitpunkte 184d und 570d nach Versuchsbeginn gemäß der 1. Spalte an

Tabelle A2-33: Korrelationskoeffizienten r_s von X(t) mit ausgewählten Parametern

X(t)	$D(t)^+$	Feinkorn	$S(t)^+$	$CO_2(t)^+$	**TOC**	S_2^{2-}	$(NO_2/D)(t)^+$	$(N_2O/D)(t)^+$
-X(2d)	-.39	$-.12_{22}$	-.21	$.03_{16}$	.30	.13	.29	.51*
-X(7d)	-.27	$.09_{22}$	-.35	$.53_{17}$*	.65**	.31	.52*	.68**
-X(21d)	.32	$.46_{22}$*	.21	$-.13_{16}$	.39	.74**	.41	-.04
-X(184d)	.61**	$.33_{22}$	.49*	.01	.13	.50*	-.25	-.39
-X(365d)	$.86_{19}$**	$.55_{22}$**	.82**	$.07_{19}$	.37	.66**	$-.20_{19}$	0_{19}
-X(570d)	$.86_{18}$**	$.37_{17}$	$.92_{18}$**	--	$.21_{18}$	$.40_{18}$	$-.11_{18}$	$.19_{18}$

Tiefgestellte Ziffer: Anzahl der Datenpaare n, wenn n ≠ 23, *Signifikanzniveau: 0,05, ** Signifikanzniveau: 0,01, $^+$(t)) ist der Zeitpunkt jeweils korrespondierende Zeitpunkt gegenüber –X(t) und D(t), das heißt D(t) nimmt dabei die Werte für die Zeitpunkte 2d bis 570d nach Versuchsbeginn gemäß der 1. Spalte an

Tabelle A2-34: r_s von Lachgaskonzentration mit ausgewählten Parametern$^+$

	$N_2O(2d)$	$N_2O(7d)$	$N_2O(21d)$	$N_2O(184d)$	$N_2O(365d)$	$N_2O(570d)$
TOC	.17	.56**	.52*	.39	$.29_{19}$	$.24_{18}$
S_2^{2-}	.06	.45*	.40	.48	$-.04_{19}$	$.23_{18}$
$-E(t)^+$	-.25	.63**	.34	.38	$.30_{19}$	$.67_{18}$**
$S(t)^+$	.22	.26	.24	.37	$.42_{19}$	$.72_{18}$**
$\beta NO_2^-(t)^+$	-.07	-.56**	-.29	.24	$.08_{19}$	$.12_{18}$
$D(t)^+$	.60**	.25	.15	.37	$.30_{19}$	$.62_{18}$**
$\beta(CO_2)^+$	$.72_{16}$**	$.39_{17}$	$.67_{16}$**	-.34	$.07_{19}$	--
$-X(t)^+$	-.48*	.61**	.31	.23	$.33_{19}$	$.78_{18}$**
$\beta O_2(t)^+$			-.14			$-.08_{18}$
$Eh(t)^+$			-.22			$.41_{18}$
$pH(t)^+$			.28			$-.48_{18}$*
$\beta(HCO_3^-)(t)^+$			$.59_{20}$**			$-.37_{15}$

Tiefgestellte Ziffer: Anzahl der Datenpaare n, wenn n ≠ 23, *Signifikanzniveau: 0,05, ** Signifikanzniveau: 0,01, $^+$(t)) ist der Zeitpunkt jeweils korrespondierende Zeitpunkt gegenüber N2O(t), das heißt beispielsweise -E(t) nimmt dabei die Werte für die Zeitpunkte 2d bis 570d nach Versuchsbeginn an, $^+$Ausgangsdaten: Tabelle A2-14 (N2O), A2-3 (TOC), A2-5 (S_2^{2-}), A2-13 (-E), A2-16 (S), A2-12 ($\beta(NO_2^-)$), Σ(A2-14, A2-15) (D), A2-14 ($\beta(CO_2)$), Σ(A2-13, A2-14, A2-15) (X), A2-19 & A2-20 (Rest)

Tabelle A2-35: r_s von Nitritkonzentration mit ausgewählten Parametern$^+$

	NO_2^- (2d)	NO_2^- (7d)	NO_2^- (21d)	NO_2^- (184d)	NO_2^- (365d)	NO_2^- (570d)
TOC	.13	-.28	-.09	-.15	$-.12_{21}$	$-.03_{19}$
S_2^{2-}	-.16	-.16	-.02	.15	$.41_{21}$	$.10_{19}$
$-E(t)^+$	-.06	-.24	.35	.16	$.26_{21}$	$.23_{19}$
$S(t)^+$	-.19	.29	.24	-.09	$-.01_{21}$	$-.03_{19}$
$D(t)^+$	.32	.56**	.66**	.14	$.16_{19}$	$.28_{18}$
$\beta(CO_2)(t)^+$	$-.31_{16}$	$-.59_{17}$*	$-.67_{16}$**	$-.78_{23}$**	$-.57_{19}$*	--
$-X(t)^+$	.29	.12	-.53	.16	$.20_{21}$	$-.02_{18}$
$\beta O_2(t)^+$				-.21		$.22_{19}$
$Eh(t)^+$				-.68**		$-.55_{19}$*
$pH(t)^+$				.81**		$.55_{19}$*
$\beta(HCO_3^-)(t)^+$				$.78_{20}$**		$.51_{16}$*

Tiefgestellte Ziffer: Anzahl der Datenpaare n, wenn n ≠ 23, *Signifikanzniveau: 0,05, ** Signifikanzniveau: 0,01, $^+$(t)) ist der Zeitpunkt jeweils korrespondierende Zeitpunkt gegenüber NO_2^-(t), das heißt beispielsweise -E(t) nimmt dabei die Werte für die Zeitpunkte 2d bis 570d nach Versuchsbeginn an, $^+$Ausgangsdaten: Tabelle A2-12 (NO_2^-), A2-3 (TOC), A2-5 (S_2^{2-}), A2-13 (-E), A2-16 (S), A2-12 ($\beta(NO_2^-)$), Σ(A2-14, A2-15) (D), A2-14 ($\beta(CO_2)$), Σ(A2-13, A2-14, A2-15) (X), A2-19 & A2-20 (Rest)

Anlage 3: Untersuchungen im Feld

Tabelle A3- 1: Ausgewählte Parameter der Grundwassergüte im Gebiet Wehnsen, Juni 2004, Teil I

MEST _KBEZ	GOK	Filter-oberkante	Wasser-spiegel	Temp-eratur	pH	Eh	Lf	HCO_3^-	O_2	Ca^{2+}	Cl^-	Fe_{ges}	K^+	Mg^{2+}	Mn_{ges}	Na^{2+}	NO_3^-	NO_2	SO_4^{2-}
	[mNN]	[m u GOK]	[m u GOK]	[°C]	[-]	[mV]	[µS/cm]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
0018	63	42	5,32	10	5,28	303	290	9,76	5,5	51	54,35	<0,2	3,92	11	<0,1	26	79,72	n.n.	81,87
1009	78,2	21	16,05	9,6	5,26	313	363	15,86	10,1	59	61,54	<0,2	3,02	17	<0,1	24	93,41	n.n.	119,2
1012	72,1	9	8,54	9,7	4,89	213	555	15,25	9,27	57	55,78	<0,2	1,74	21,5	0,13	21,5	127,08	n.n.	103,1
1020	63,2	11	5							12	9,48	<0,2	1,25	1	<0,1	11,5	1,09	n.n.	21,33
1028	61,65	6.2	2,58	10,5	6,23	208	516	98,24	0,01	34	25,27	<0,2	1,5	7	0,4	26,5	63,42	n.n.	72,79
1055	74,4	13.5	12,05	9,9	5,03	329	503	9,15	10,9	50	60,45	<0,2	2,84	18,5	0,1	26	91,2	n.n.	85,38
1066	59,7	7.3	1,36	8,9	6,42	215	716	112,88	1,4	104	64,24	<0,2	18,5	11	<0,1	24,5	128,85	n.n.	99,88
1113	76	19	11,65	10,5	5,36	317	582	8,79	8,86	68	55,67	<0,2	3,94	17	<0,1	21	132,59	n.n.	94,13
1114	79,1	20	12,6	10,3	5,26	326	560	12,20	10,7	58	52,4	<0,2	3,48	23	<0,1	17,5	137,59	n.n.	78,8
1118	78,05	14	11,18	10,3	5,54	294	439	26,24	9,89	46	36,9	<0,2	3,06	17	<0,1	20	50,71	n.n.	122,2
1119	78,4	18	10,53	10,1	5,18	324	611	11,59	9,78	62	56,03	<0,2	3,24	27,5	<0,1	22	150,7	n.n.	90,47
1120	79,4	14.5	12,64	10,4	5,54	269	605	15,25	12,4	72	66,03	<0,2	2,44	19,5	<0,1	26,5	128,67	n.n.	115,5
1121	70	7.5	2,99	9,2	6,83	127	775	372,81	0,91	135	16,67	<0,2	2,58	6	<0,1	54	17,61	n.n.	134,7
2009	78,2	47	18,77	10	6,75	157	180	75,66	0	30	7,03	<0,2	1,01	2	0,1	11,5	0,35	n.n.	27,19
2012	72,1	41	12,49	9,7	6,77	-158	351	80,54	0	57	30,21	1,38	1,52	3	0,34	14,5	0,15	n.n.	87,67
2018	63,1	85	5,19	10,3	6,4	-25	276	54,92	0,49	38	33,54	2,64	1,42	3	0,29	16,5	1,29	n.n.	68,44
2020	63,2	91	5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	28	18,3	<0,2	1,62	2	<0,1	17	4,86	n.n.	35,41
2028	61,65	34.2	2,9	10,5	5,34	295	518	15,25	1,61	65	58,39	<0,2	3,96	10	<0,1	27	60,08	n.n.	120,1
2112	80,6	64	22,56	10,9	7,44	129	310	144,00	0	49	13,45	<0,2	1,78	5,5	<0,1	14	5,85	n.n.	41,99
2113		43		n.b.	7,24	-88		101,11	0	n.b.	37,43	<0,2	n.b.	n.b.	<0,1	n.b.	0,97	0,2	127,6
2120	79,45	52	22,63	10,8	7,44	-158	434	195,25	0	62	37,49	1,08	2,02	3,5	0,27	34,5	n.n.	n.n.	37,73
2121	70	37	8,59	10,5	6,92	134	724	280,68	0,66	131	41,35	<0,2	6,5	4	<0,1	34,5	41,72	n.n.	102,2
2122		35		10,8	6,51	77	124,7	64,07	3	n.b.	78,55	<0,2	n.b.	n.b.	<0,1	n.b.	86,7	n.n.	144,5
2123		43		10,7	5	291		6,83	0,22	n.b.	34,69	<0,2	n.b.	n.b.	<0,1	n.b.	19,13	n.n.	100,5

Legende	MEST_KBEZ:	Messstellenbezeichnung	Eh:	Redoxpotential	n.n.	nicht nachweisbar
			Lf:	elektrische Leitfähigkeit	n.b.	nicht bestimmt

Tabelle A3-1: Teil II

MEST	GOK [m_NN]	Filter-oberkante [m u GOK]	Wasser-spiegel [m u GOK]	NO_3^- (Juni_04) [mg/l]	N_2O (Juni_04) [µg/l]	N_2 (Juni_04) [µmol/l]	Ar (Juni_04) [µmol/l]	N2/Ar (Juni_04) [-]	N_2_exc (Juni_04) [mg/l]N	NO_3^--in (Juni_04)- [mg/l]	NO_3^- (Okt_05) [mg/l]	N_2O (Okt_05) [µg/l]	N_2_exc (Okt_05) [mg/l]N	NO_3^--in (Okt_05 [mg/l]	DOC (Okt_05) [mg/l]	t_a 2) (2005) [a]	Anteil_t_a 3) (2005) [%]
0018	63	-42	5.32	79.72	109.46	580.0176	14.20877	40.82	1.50	86.37	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1009	78.2	-21	16.05	93.41	12.49	454.5522	12.15004	37.41	0.00	92.95	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1012	72.1	-9	8.54	127.08	127.32	475.9805	12.63882	37.66	0.01	127.14	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6	100
1020	63.2	-11	5	1.09	21.11	502.101	11.46865	43.78	2.89	13.90	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1028	61.65	-6.2	2.58	63.42	28.76	545.0891	12.3278	44.22	3.10	77.14	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1055	74.4	-13.5	12.05	91.2	28.79	359.2813	9.639213	37.27	0.00	90.45	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1066	59.7	-7.3	1.36	128.85	91.33	415.6625	9.637652	43.13	2.59	140.30	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1113	76	-19	11.65	132.59	386.31	374.5768	9.438545	39.69	0.97	136.87	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1114	79.1	-20	12.6	137.59	23.46	276.7591	7.309539	37.86	0.11	138.07	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1118	78.05	-14	11.18	50.71	23.00	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1119	78.4	-18	10.53	150.7	60.22	595.3405	11.54309	51.58	6.56	179.75	144.28	18.00	3.77	148.07	1.98	23	100
1120	79.4	-14.5	12.64	128.67	20.62	564.248	11.06992	50.97	6.27	156.46	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
1121	70	-7.5	2.99	17.61	22.69	572.2158	11.05404	51.77	6.65	47.05	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
2009	78.2	-47	18.77	0.35	4.31	737.9568	13.0654	56.48	8.87	39.62	7.57	104.0	3.05	10.72	1.22	n.b.	n.b.
2012	72.1	-41	12.49	0.15	3.74	788.3918	12.90742	61.08	11.03	49.00	0.71	38.0	10	10.75	0.6	36	ca. 30
2018	63.1	-85	5.19	1.29	9.87	1047.996	16.79854	62.39	11.64	52.86	1.36	8.0	11.25	12.62	2.9	n.b.	n.b.
2020	63.2	-91	5	4.86	89.45	720.4605	14.43963	49.89	5.77	30.41	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
2028	61.65	-34.2	2.9	60.08	997.11	728.1528	14.19524	51.30	6.43	88.54	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
2112	80.6	-64	22.56	5.85	109.00	775.0329	14.29596	54.21	7.80	40.39	29.4	59.0	4.95	34.41	0.7	n.b.	n.b.
2113		-43		0.97	17.13	408.795	9.980427	40.96	1.57	7.90	0.42	1.0	18.11	18.53	1	36	ca. 40
2120	79.45	-52	22.63	n.n.	3.62	702.0772	12.68047	55.37	8.34	36.94	n.n.	1.0	10.17	10.17	1.37	32	ca. 30
2121	70	-37	8.59	41.72	28.17	683.7005	13.09924	52.19	6.85	72.05	42.05	44.0	6.07	48.16	1.51	n.b.	n.b.
2122		-35		86.7	909.05	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	79.56	44.0	9.87	89.87	1.17	n.b.	n.b.
2123		-43		19.13	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	22.17	82.0	10.47	32.72	1.21	29	100

Legende :

MEST : Messstellenbezeichnung
Lf : elektrische Leitfähigkeit
N_2_exc : Überschuss N_2
t_a 2) : Altersdatierung aus Rogge&Co. (2006)
Anteil_t_a 3) : Anteil des datierten Wassers an der Probe
NO_3^--in : Nitrateintrag entsprechend Gleichung (5 - 5)

Tabelle A3-1a: Ausgewählte Messwerte vom Juni 2004 (06/2004) und Oktober 2005 (10/2005)

Messstelle / Parameter[2)]	1119	2009	2121	2012	2120	2113	2112	2018	
NO_3^- - N (06/2004)	34,03	0,08	9,42	0,03	<0,1	0,22	1,32	0,29	[mg·l^{-1}]
NO_3^- - N (10/2005)	32,58	1,71	9,50	0,16	<0,1	0,09	6,64	0,31	[mg·l^{-1}]
Diff(NO_3^--N)[1)]	-1,45	1,63	0,07	0,13	0	-0,12	5,32	0,02	[mg·l^{-1}]
N_{2_exc}-N (06/2004)	6,56	8,87	6,85	11,03	8,34	1,57	7,80	11,64	[mg·l^{-1}]
N_{2_exc}-N (10/2005)	3,77	3,05	6,07	10,00	10,17	18,11	4,95	11,25	[mg·l^{-1}]
Diff(N_{2_exc}-N)[1)]	-2,79	-5,82	-0,78	-1,03	1,83	16,54	-2,85	-0,39	[mg·l^{-1}]
N_2O-N (06/2004)	6,4	1,4	9,0	1,2	1,1	5,4	34,7	3,1	[µg·l^{-1}]
N_2O-N (10/2005)	5,7	33,1	14,0	12,1	0,3	0,3	18,8	2,5	[µg·l^{-1}]
Diff(N_2O-N)[1)]	-0,7	31,7	5,0	10,9	-0,8	-5,1	-15,9	-0,6	[µg·l^{-1}]
D (06/2004)[3)]	6,57	8,87	6,86	11,03	8,34	1,58	7,83	11,64	[mg·l^{-1}]
D (10/2005)[3)]	3,78	3,08	6,08	10,01	10,17	18,11	4,97	11,25	[mg·l^{-1}]
Diff(D)[1)]	-2,79	-5,79	-0,77	-1,02	1,83	16,53	-2,87	-0,39	[mg·l^{-1}]
N_{input} (t_a)	40,79	8,99	16,35	11,12	8,38	1,79	9,17	11,99	[mg·l^{-1}]
N_{input} (t_a + 1,3a)	36,36	4,79	15,58	10,17	10,17	18,21	11,61	11,56	[mg·l^{-1}]
Diff(N_{input})[1)]	-4,44	-4,20	-0,77	-0,95	1,79	16,41	2,44	-0,44	[mg·l^{-1}]
O_2 (06/2004)	9,78	<0,1	0,66	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,49	[mg·l^{-1}]
O_2 (10/2005)	7,95	1,09	<0,1	<0,1	0,14	<0,1	0,91	0,00	[mg·l^{-1}]
pH (06/2004)	5,18	6,75	6,92	6,77	7,44	7,24	7,44	6,40	
pH (10/2005)	5,55	6,15	6,95	6,48	7,50	6,97	6,68	6,42	
Diff(pH)[1)]	0,37	-0,60	0,03	-0,29	0,06	-0,27	-0,76	0,02	
SO_4^{2-} (06/2004)	90,50	27,20	102,20	87,70	37,70	127,58	42,00	68,40	[mg·l^{-1}]
SO_4^{2-} (10/2005)	91,36	32,59	108,65	75,68	56,68	135,22	55,01	63,60	[mg·l^{-1}]
Diff(SO_4^-)[1)]	0,86	5,39	6,45	-12,0	18,98	7,64	13,01	-4,80	[mg·l^{-1}]
HCO_3^- (06/2004)	11,59	75,64	280,60	80,52	195,20	102,48	143,96	54,90	[mg·l^{-1}]
HCO_3^- (10/2005)	8,54	45,93	280,60	45,75	167,75	107,36	109,80	42,70	[mg·l^{-1}]
Diff(HCO_3^-)[1)]	-3,05	-29,71	0,00	-34,8	-27,45	4,88	-34,16	-12,2	[mg·l^{-1}]

[1)]Differenz aus den gemessenen Parametern 2005 und 2004 [2)] mit Zeitpunkt der Probenahme in Klammer, t_a…GW-Alter, [3)]D: Denitrifikation nach Gleichung (5 – 3)

.

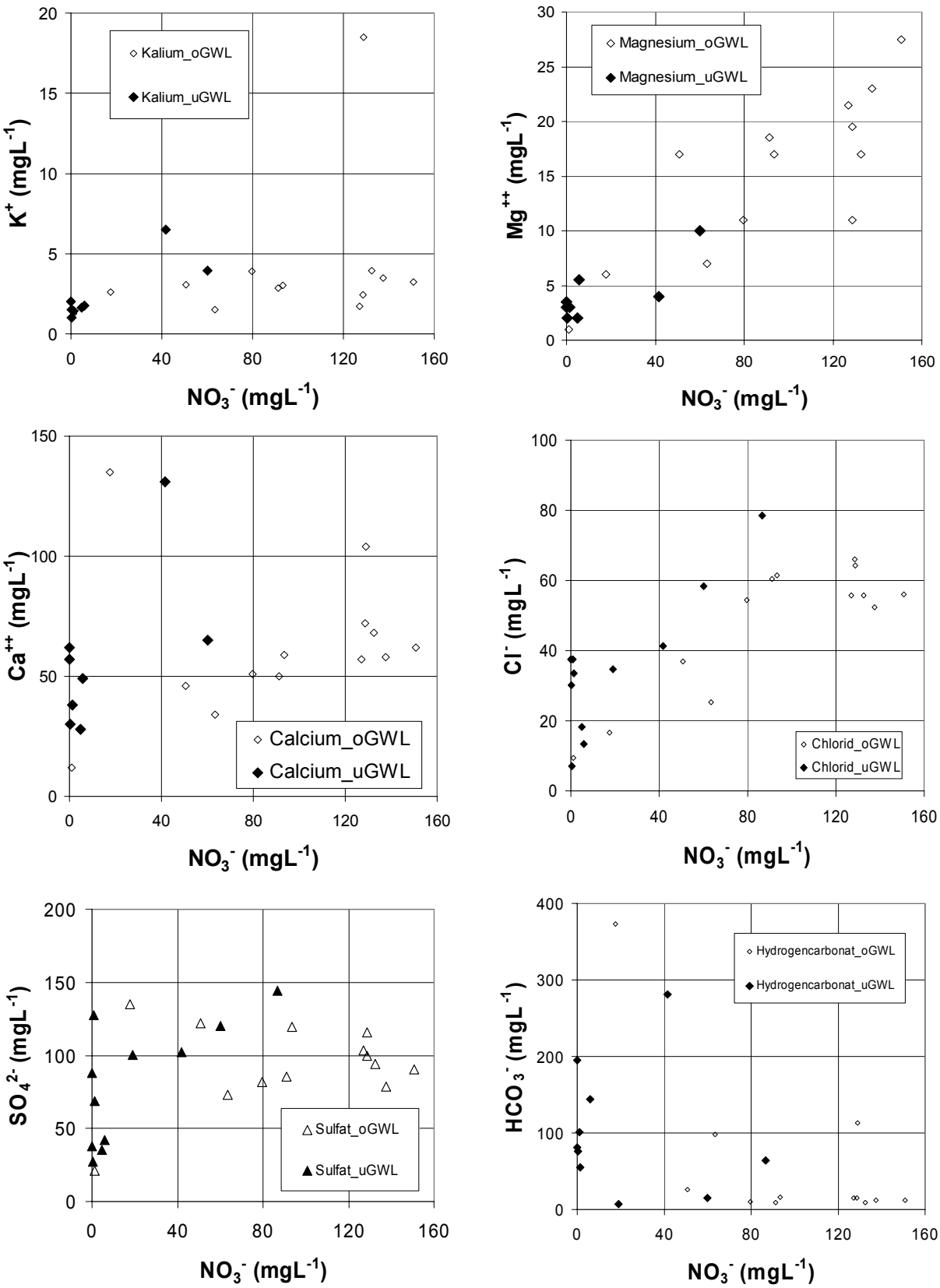


Abbildung A3- 1: Relationsdiagramme, Wehnsen, Juni 2004

Die Richtung der Pfeile kennzeichnet den Ablauf folgender Reaktionen, siehe auch Kapitel 3:

A … organotrophe Denitrifikation nach der Beziehung (vgl. Gleichung (3 – 7)):
$5C_{org} + 4NO_3^- + 2H_2O \rightarrow 2N_2 + 4HCO_3^- + CO_2$

B1 ... lithotrophe Denitrifikation unter Bildung von FeOOH (1. + 2. Teilschritt der chemo-lithotrophen Denitrifikation):
$5\ FeS_2 + 14NO_3^- + 4H^+ \rightarrow 7N_2 + 10SO_4^{2-} + 5Fe^{2+} + 2H_2O$ (1. Schritt) und
$10Fe^{2+} + 2NO_3^- + 14H_2O \rightarrow N_2 + 10FeOOH + 18H^+$ (2. Schritt)
oder kombiniert:
$2FeS_2 + 6NO_3^- + 2H_2O \rightarrow 3N_2 + 4SO_4^{2-} + 2FeOOH + 2H^+$ bzw.:
$2FeS_2 + 6NO_3^- + 2HCO_3^- \rightarrow 3N_2 + 4SO_4^{2-} + 2FeOOH + 2CO_2$

B2 … lithotrophe Denitrifikation unter Bildung von Fe^{2+} (nur 1. Teilschritt der chemo-lithotrophen Denitrifikation):
$5\ FeS_2 + 14NO_3^- + 4H^+ \rightarrow 7N_2 + 10SO_4^{2-} + 5Fe^{2+} + 2H_2O$ (1. Schritt) bzw.:
$5FeS_2 + 14NO_3^- + 2H_2O + 4CO_2 \rightarrow 7N_2 + 10SO_4^{2-} + 5Fe^{2+} + 4HCO_3^-$

C … Sulfatreduktion:
$15C_{org} + 8SO_4^{2-} + 4FeOOH + 6H_2O + CO_2 \rightarrow 4FeS_2 + 16HCO_3^-$

D … aerobe Pyritoxidation:
$4FeS_2 + 15O_3^- + 16HCO_3^- \rightarrow 8SO_4^{2-} + 4FeOOH + 6H_2O + 16CO_2$

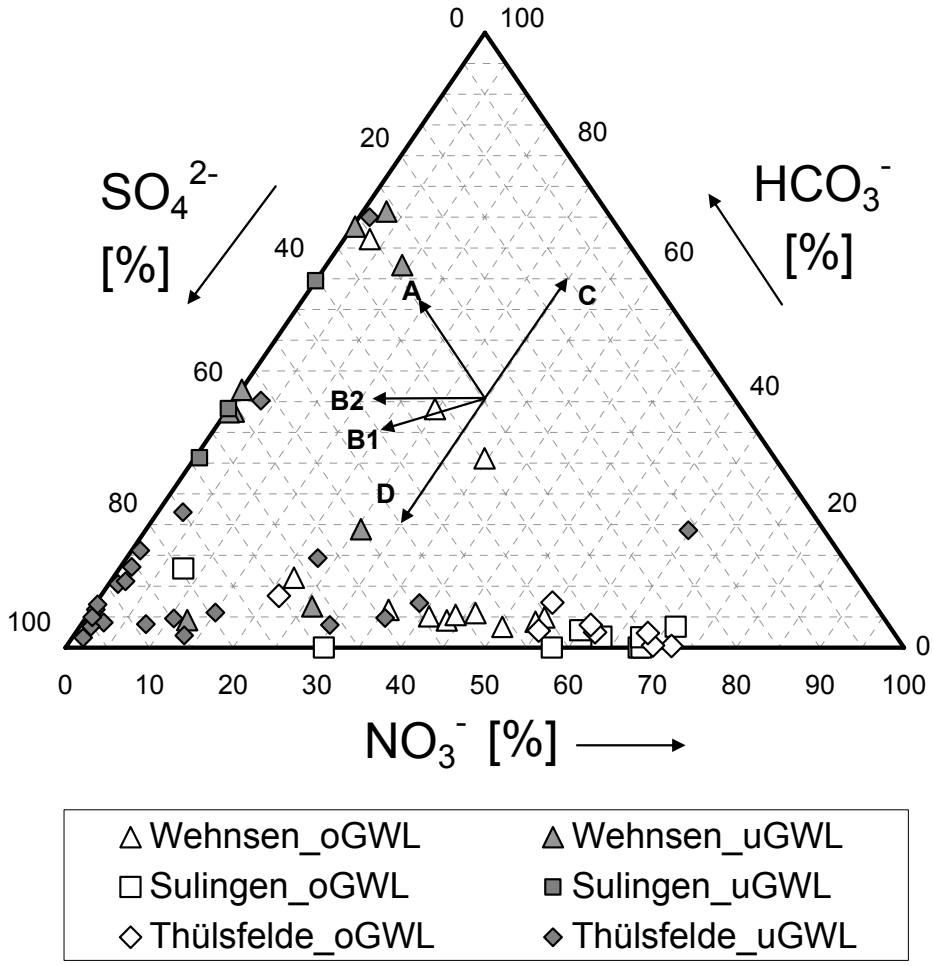


Abbildung A3- 2: Dreiecksdiagramm der spezifischen Äquivalentanteile von NO_3^-, HCO_3^- und SO_4^{2-}, nach RÖDELBERGER et al. (1992), Messkampagnen von 2004

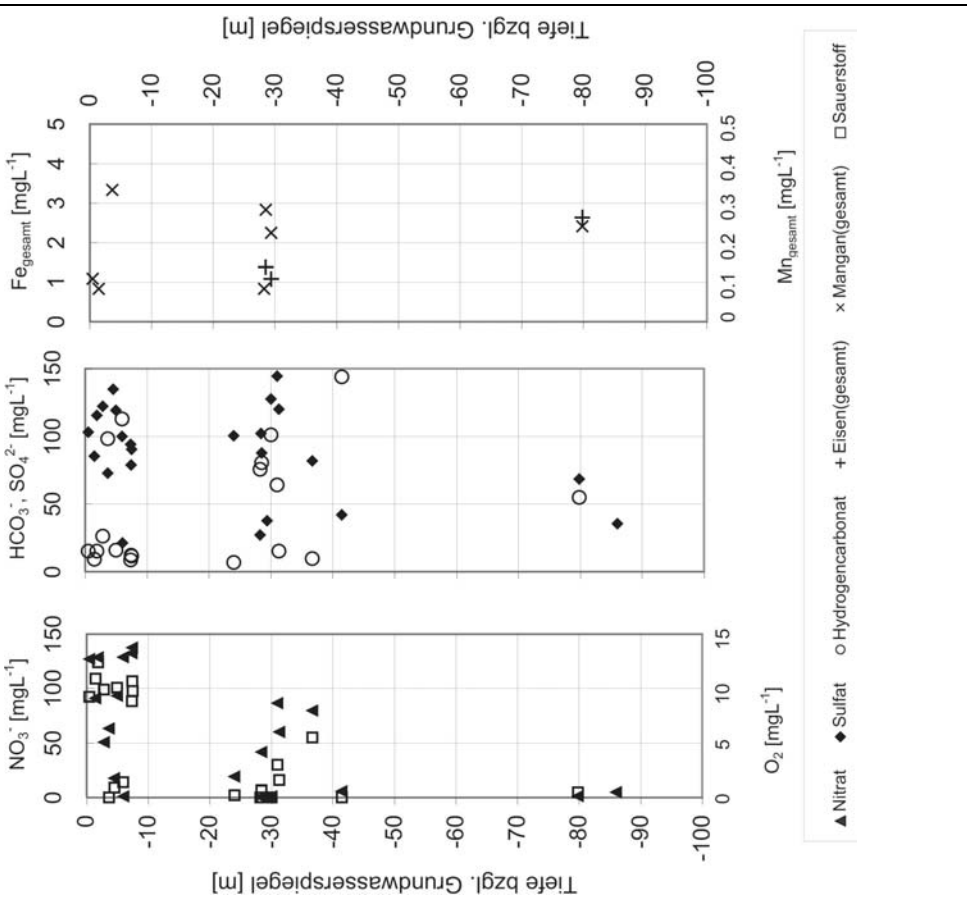


Abbildung A3- 3: Tiefenprofile ausgewählter Parameter der Wassergüte, Wehnsen, Juni 2004

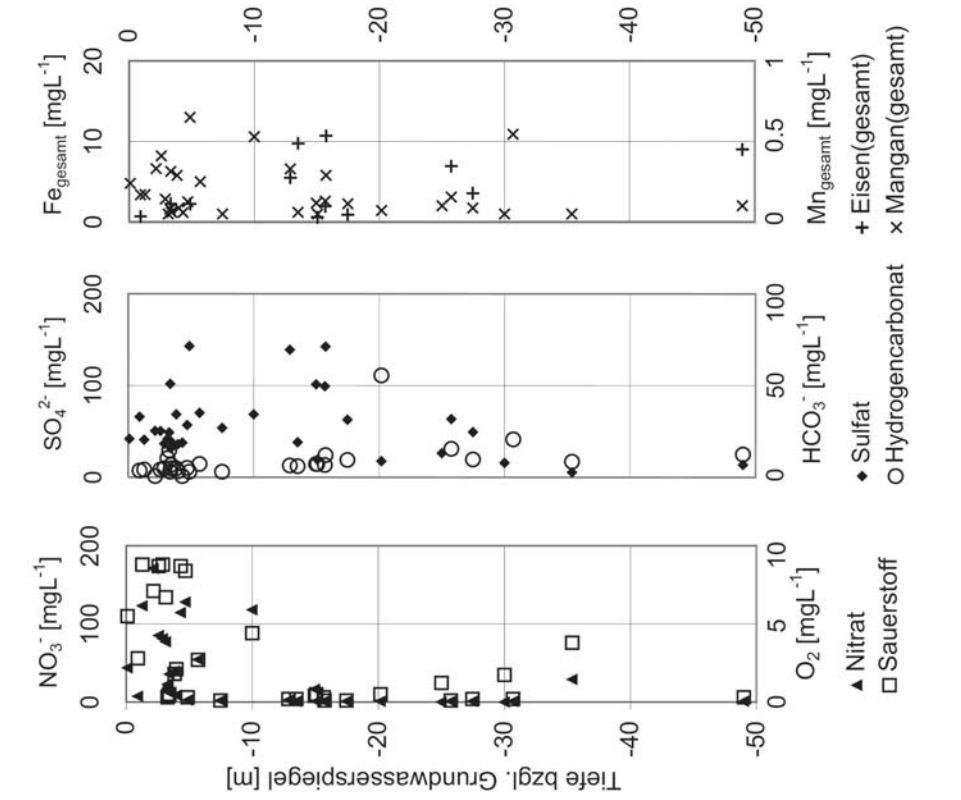


Abbildung A3- 4: Tiefenprofile ausgewählter Parameter der Wassergüte, Thülsfelde, Aug. 2004

Tabelle A3-2: Ausgewählte Parameter der Grundwassergüte im Gebiet Sulingen, Oktober 2004

MEST _KBEZ	Filter-oberkante [m u GOK]	Wasser-spiegel [m u GOK]	Wasser-Temperatur [°C]	pH [-]	Eh [mV]	Lf [µS/cm]	HCO_3^- [mg/L]	O_2 [mg/L]	Ca^{2+} [mg/L]	Cl^- [mg/L]	Fe_{ges} [mg/L]	K^+ [mg/L]	Mg^{2+} [mg/L]	Mn_{ges} [mg/L]	Na^{2+} [mg/L]	NO_3^- [mg/L]	NH_4^+ [mg/L]	SO_4^{2-} [mg/L]
124	11.6	11.55	10.5	5	n.b.	310	n.b.	11	23	11	n.b.	4.5	13	0.08	9.2	46	<0.0125	80
125	15	11.55	10.1	4.9	n.b.	488	6.00	10.8	41.2	38.61	0.1189	21.25	21.25	0.13	12.7	130.91	<0.0125	62.86
126	17.5	11.55	10.5	4.9	n.b.	580	n.b.	9.9	51	52	n.b.	4.7	22	0.14	11	150	<0.0125	53
127	23	11.55	10	5.1	n.b.	479	6.00	10.2	42	51	0.0357	9.73	6.375	0.059	25.2	129.2	<0.0125	35.93
128	30.5	11.55	9.9	6.7	7	410	51.00	3.3	22.8	87.4	0.2364	3.1	8.7	0.048	40.6	<0.1	<0.0125	27.17
117	45	11.55	10.3	5.8	264	290	21.00	0.2	21	59	6.7	2.9	3.9	0.08	18	<0.1	0.1	26
119	10	9.2	9.6	4.8	n.b.	380	n.b.	9.8	24	14	n.b.	11	14	0.39	9.7	120	<0.0125	43
120	12.5	9.2	9.4	4.8	n.b.	378	3.00	10.8	25.2	14.7	n.b.	10.41	16.34	0.26	10.6	109	<0.0125	47.1
121	16.5	9.2	10	4.9	n.b.	420	n.b.	9.7	34	31	n.b.	4.8	13	0.13	14	91	<0.0125	51
122	23	9.2	9.6	5	n.b.	563	3.00	10.1	50.7	82.76	0.157	10.51	10.51	0.1032	33.05	125	<0.0125	43.55
123	30.5	9.2	9.7	5.8	-67	401	18.00	9.7	29.6	57.24	2.273	6.38	6.38	0.16	33.7	10.93	<0.0125	87.81
118	45	9.2	10	5.8	n.b.	170	12.00	0.1	9.2	28	2.9	1.9	1.7	0.03	14	0.22	0.07	21

Legende MEST_KBEZ … Messstellenbezeichnung
Eh … Redoxpotential
Lf …elektrische Leitfähigkeit
n.n. … nicht nachweisbar
n.b. … nicht bestimmt
NO_2^- … wurde nicht nachgewiesen

MEST _KBEZ	Filter-oberkante [m u GOK]	Wasser-spiegel [m u GOK]	NO_3^- [mg/L]	N_2O [mg/L]	N2/Ar Okt_04 [-]	N_2_exc [mg/L]N	NO_3^--in [mg/L]	t_a 2) [a]
124	11.6	11.55	46.0	n.b.	n.b.			n.b.
125	15	11.55	130.9	n.b.	42.60	2.35	141.32	n.b.
126	17.5	11.55	150.0	n.b.	37.7*	0.00	150.00	n.b.
127	23	11.55	129.2	n.b.	n.b.			n.b.
128	30.5	11.55	<0.1	n.b.	58.89	10.01	44.35	10
117	45	11.55	<0.1	n.b.	52.88	7.19	31.83	50
119	10	9.2	120.0	n.b.	n.b.			n.b.
120	12.5	9.2	109.0	n.b.	42.38	2.25	118.96	n.b.
121	16.5	9.2	91.0	n.b.	n.b.			n.b.
122	23	9.2	125.0	n.b.	n.b.			n.b.
123	30.5	9.2	10.9	n.b.	67.95*	14.22	0.00	n.b.
118	45	9.2	0.2	n.b.	48.48	5.12	22.89	n.b.

Legende

N_2_exc … Überschuss N_2
NO_3^--in … Nitrateintrag entsprechend des Grundwasseralters (ohne Berücksichtigung der Lachgaskonezntration)

* … Werte vom März 2005 aus Geries (2005)
t_a 2) … Altersdatierung aus aus Geries (2005). 3H/He-Methode

Tabelle A3- 3: Ausgewählte Parameter der Grundwassergüte im Gebiet Thülsfelde, Juli 2004

MEST KBEZ	Filter-oberkante [m bzgl. Wasserspiegel]	Wasser-Temperatur [°C]	pH [-]	Lf [µS/cm]	HCO_3^- [mg/L]	O_2 [mg/L]	Ca^{2+} [mg/L]	Cl^- [mg/L]	Fe_{ges} [mg/L]	K^+ [mg/L]	Mg^{2+} [mg/L]	Mn_{ges} [mg/L]	Na^{2-} [mg/L]	NO_3^- [mg/L]	NH_4^+ [mg/L]	SO_4^{2-} [mg/L]
A 183	-35.38	10.2	5.26	239	8.4	3.8	14.45	47.24	0.50	2.59	3.50	<0.05	21.3	29.0	<0.0125	5.6
F 186	-25.8	10.2	5.47	360	9.9	0.2	24.35	45.81	12.29	3.76	5.60	0.16	21.6	<0.1	<0.0125	94.6
D_216	-6	10.4	4.78	462	3	0.2	44	23.61	4.26	33.85	3.90	0.85	9.7	<0.1	0.339	187.7
B 226	-25.7	10	4.5	179	8.1	1.2	10.35	36.28	7.65	2.50	3.55	0.13	14.4	<0.1	0.078	40.5
D 245	-6.3	10.2	5.39	314	13.8	0.1	21.65	35.69	18.70	2.50	4.70	0.20	15.0	<0.1	0.3145	87.7
A 248	-3.13	10.7	5.09	301	10.2	6.7	22.05	17.41	0.50	4.04	14.10	<0.05	8.7	77.2	<0.0125	42.0
E_262	-23.24	9.5	4.61	151	9.3	0.2	10.3	17.10	3.54	2.50	1.63	0.06	11.6	<0.1	0.0795	37.9
B 265	-4.38	9.9	4.89	342	8.4	0.2	27	16.15	3.66	20.65	2.62	0.37	16.3	<0.1	0.1915	131.4
B 269	-3.3	10.1	5.29	189	10.8	0.2	8.35	11.55	0.50	23.70	2.11	0.06	6.2	24.5	0.255	27.4
D_276	-25	9.3	5.02	191	10.5	0.2	4.5	17.00	6.45	3.15	3.50	<0.05	14.0	<0.1	0.4965	40.3
F 324	-18.8	10	4.99	403	5.4	0.1	13.7	51.95	20.00	3.23	6.33	0.30	25.1	<0.1	0.7335	74.6
A 335	-5.69	10.1	5.01	307	7.2	2.7	13.4	13.85	0.50	8.54	18.60	0.25	7.8	54.4	<0.0125	70.1
A 336	-15.74	10.1	5.36	396	12	0.1	28.7	27.60	10.70	3.40	16.40	0.29	12.8	<0.1	<0.0125	142.5
A_337	-25.75	10.1	5.18	267	15.3	0.1	17.15	32.95	6.95	2.82	5.03	0.16	19.7	<0.1	0.094	63.5
F 343	-5.05	10.2	4.75	511	6	0.1	15.3	10.75	47.35	34.45	14.25	0.25	7.5	<0.1	1.08	227.5
F 343	-4.8	10.3	4.39	375	3.3	0.2	30.8	14.00	0.57	18.40	4.82	0.18	8.6	90.2	0.065	71.0
A 353	-20.18	10.2	5.62	149	54.6	0.5	4	7.90	21.60	2.50	1.50	0.07	13.3	<0.1	0.41	17.6
E_354	-20	10.4	5.18	340	8.7	3.4	11.75	56.30	0.50	2.73	14.55	0.18	25.5	37.9	<0.0125	29.1
F 355	-19.5	10.3	5.08	377	6.6	3.8	24.95	41.10	0.50	3.11	14.15	0.06	18.5	116.4	<0.0125	6.3
C 366	-5.6	9.8	4.34	565	0.6	1.1	29.35	46.00	0.50	19.70	12.35	0.51	16.6	147.0	0.052	67.2
A 368	-13.5	10.4	5.05	216	6	0.2	5.105	40.50	9.75	2.50	5.44	0.06	15.2	<0.1	0.648	38.3
A_369	-4.31	10.1	4.52	420	0.6	8.7	35.8	34.65	0.50	20.30	4.49	0.06	10.8	114.5	<0.0125	37.8
A 370	-15.68	10.1	5.34	276	6.6	0.3	15.15	10.20	1.94	14.75	12.15	0.13	6.7	<0.1	<0.0125	99.3
A 371	-2.89	10.3	4.92	394	4.8	8.8	26.9	39.50	0.50	16.90	13.25	0.14	8.0	81.0	<0.0125	36.7
A_372	-15.07	9.7	5.36	84	7.2	0.5	4	8.16	0.59	2.50	1.50	<0.05	8.8	<0.1	<0.0125	19.3
A 374	-3.34	9.9	4.41	320	3	0.4	16.55	19.10	2.25	7.10	14.35	0.31	9.2	20.5	0.2	102.0
A 377	-3.84	9.4	4.35	236	0.6	0.9	9.49	5.28	4.27	20.20	1.57	0.17	4.0	5.8	0.263	63.5
F 466	-1.7	9.9	5.17	243	11.4	0.3	21.1	9.62	0.50	15.50	2.48	<0.05	6.1	72.4	<0.0125	18.9
A_483	-3.27	10.1	5.71	220	14.4	0.3	20.4	10.75	0.50	17.50	4.18	0.08	5.5	22.9	<0.0125	48.8
A SGM1	-0.1	n.b.	5.42	206	n.b.	5.5	19.8	15.70	<0.1	19.90	4.10	0.24	8.0	43.8	<0.0125	41.9
A SGM3	-10	n.b.	5.54	450	n.b.	4.4	51.5	32.60	<0.1	15.30	9.70	0.53	10.0	118.0	<0.0125	68.6
A SGM6	-25	n.b.	5.67	136	n.b.	1.22	14.3	24.10	<0.1	2.60	2.90	0.10	9.0	0.1	<0.0125	26.5
A_SGM7	-30	n.b.	5.81	151	n.b.	1.74	7.6	16.40	<0.1	3.40	1.40	<0.05	11.0	0.1	<0.0125	15.8

Legende: MEST KBEZ ... Messstellenkurzbezeichnung, die Buchstaben geben jeweils die dazugehörige Fassung A bis F an
Lf ... elektrische Leitfähigkeit

Tabelle A3- 3a: Nitrat- und N-Gaskonzentrationen im Grundwasser Thülsfelde, Juli 2004

MEST _KBEZ	Filter-oberkante [m bzgl. Wasserspiegel]	NO_3^- (Juli_04) [mg/L]	N_2O (Juli_04) [µg/L]	N_2 (Juli_04) [µmol/L]	Ar (Juli_04) [mmol/L]	N2/Ar (Juli_04) [-]	N_2_exc (Juli_04) [mg/L]N	NO_3^--in [mg/L]
A_183	-35.38	29.0	377.15	742.1	16.1	45.99	3.95	46.4
F_186	-25.8	<0.1	2.67	1025.2	16.3	62.71	11.81	53.3
D_216	-6	<0.1	1.21	857.4	8.5	100.89	29.77	132.8
B_226	-25.7	<0.1	n.b.	861.5	15.2	56.71	8.99	40.8
D_245	-6.3	<0.1	0.95	644.7	13.1	49.12	5.42	25.0
A_248	-3.13	77.2	148.35	578.9	13.8	41.84	1.99	86.0
E_262	-23.24	<0.1	3.07	581.4	16.8	34.61	0.00	1.0
B_265	-4.38	<0.1	1.57	827.3	13.5	61.24	11.12	50.2
B_269	-3.3	24.5	166.89	863.7	15.8	54.54	7.97	59.8
D_276	-25	<0.1	1.68	625.4	16.8	37.23	0.00	1.0
F_324	-18.8	<0.1	2.52	909.1	15.8	57.48	9.35	42.4
A_335	-5.69	54.4	685.48	838.4	16.8	49.91	5.79	80.0
A_336	-15.74	<0.1	2.10	919.5	13.6	67.82	14.22	64.0
A_337	-25.75	<0.1	5.34	676.5	12.2	55.49	8.42	38.3
F_343	-5.05	<0.1	2.39	865.4	8.2	105.84	32.10	143.1
F_343	-4.8	90.2	81.78	1036.4	16.5	62.91	11.90	142.9
A_353	-20.18	<0.1	1.94	562.2	16.8	33.47	0.00	1.0
E_354	-20	37.9	229.07	623.8	13.2	47.12	4.48	57.7
F_355	-19.5	116.4	5.55	582.7	16.8	34.69	0.00	116.4
C_366	-5.6	147.0	841.50	782.7	14.7	53.40	7.43	179.9
A_368	-13.5	<0.1	2.22	1220.0	14.0	87.24	23.35	104.4
A_369	-4.31	114.5	55.35	504.5	13.6	37.20	0.00	114.5
A_370	-15.68	<0.1	68.40	810.8	14.8	54.89	8.13	37.0
A_371	-2.89	81.0	n.b.	630.2	15.2	41.44	1.81	89.0
A_372	-15.07	<0.1	9.70	626.8	16.5	37.92	0.15	1.7
A_374	-3.34	20.5	105.31	1110.2	16.8	66.09	13.40	79.8
A_377	-3.84	5.8	n.b.	879.3	16.4	53.69	7.57	39.3
F_466	-1.7	72.4	127.04	663.3	16.3	40.74	1.48	78.9
A_483	-3.27	22.9	195.63	879.1	16.8	52.33	6.93	53.6
A_SGM1	-0.1	43.8	n.b.	717.6	16.8	42.90	2.49	54.8
A_SGM3	-10	118.0	n.b.	668.3	16.8	39.78	1.03	122.6
A_SGM6	-25	0.1	n.b.	693.9	15.2	49.04	5.38	23.9
A_SGM7	-30	0.1	n.b.	743.6	16.8	46.34	4.11	18.3

Legende: MEST_KBEZ … Messstellenkurzbezeichnung, Buchstabe entspricht Fassung A bis F
N_2_exc …Überschuss N_2
NO_3^--in …Nitrateintrag entsprechend des Grundwasseralters

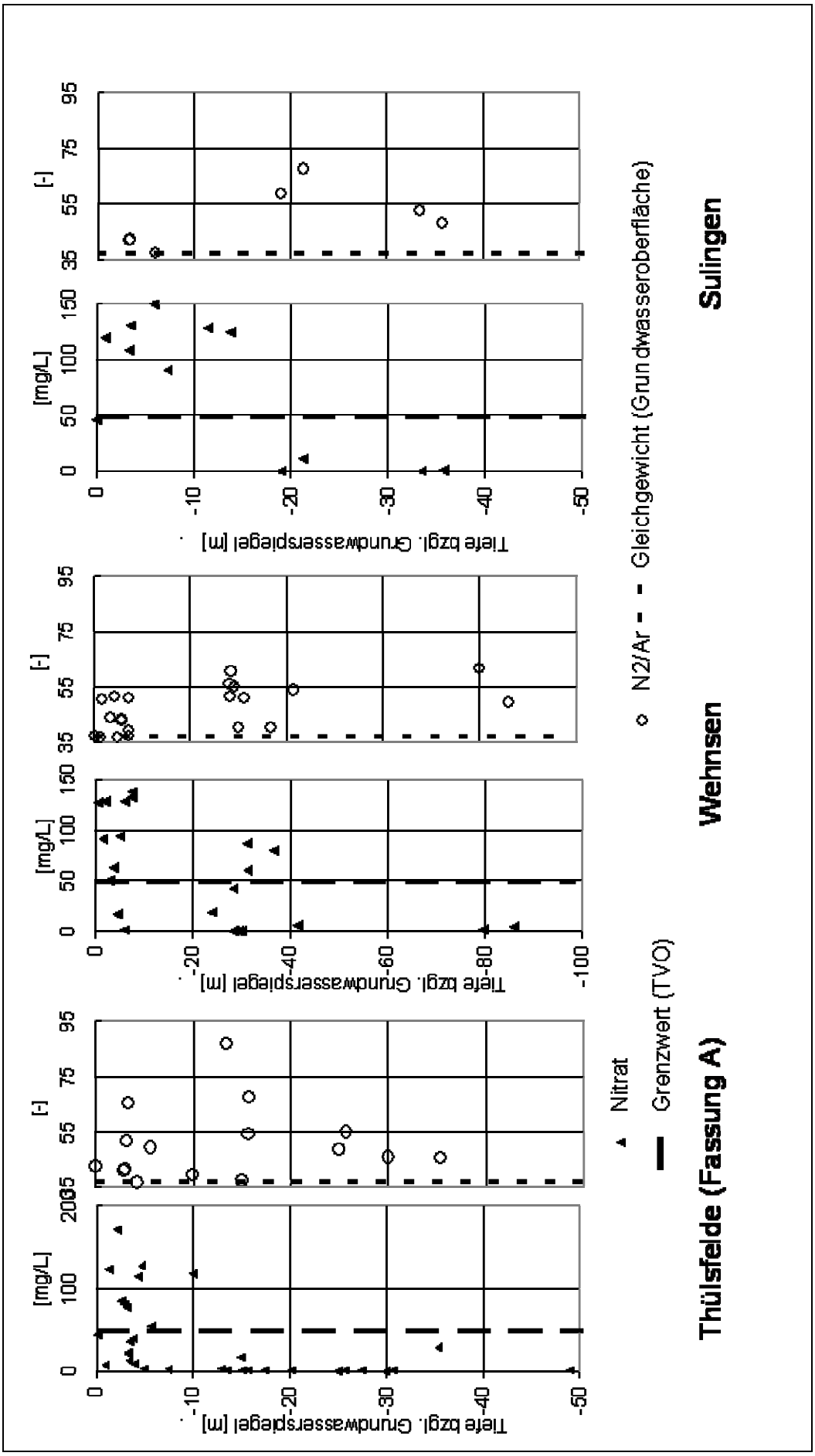


Abbildung A3- 5: Tiefenprofile der NO_3^- - Konzentration und des N_2/Ar-Verhältnisses für Wehnsen, Sulingen und Thülsfelde, 2004

Tabelle A3- 4: Abschätzung von λ_o-Werten anhand der N-Gaskonzentration

Messstelle	Filter-oberkante[1)]	NO_3^- [2)]	N_2O [2)]	NO_2^- [2)]	$N_{2\ exc}$ [2)]	t_a [3)]	D[(5)]	λ_o
	[m]	[mg·l^{-1}]	[µg·l^{-1}]	[mg·l^{-1}]	[mg·l^{-1}]N	[a]	[mg·l^{-1}]N	[mg·l^{-1}·a^{-1}]NO_3^-
Wehnsen								
1012	-0,46	127,1	127,32	<0,01	0,01	6	0,05	0,04
1119	-7,47	150,7	60,22	<0,01	6,56	23	6,58	1,27
2012	-28,51	0,2	3,735	<0,01	11,03	36	11,03	1,36
2113	-33	1,0	17,13	0,2	1,57	36	1,57	0,19
Thülsfelde								
A_183	-35,38	29,0	377,15	<0,01	3,95	48	4,07	0,38
A_335	-5,69	54,4	685,48	<0,01	5,79	13	6,01	2,05
A_369	-4,31	114,5	55,35	<0,01	0,00	10	0,02	0,01
A_371	-2,89	81,0	n,b,	<0,01	1,81	4[(a)]	1,81	2,00
A_377	-3,84	5,8	n,b,	<0,01	7,57	12	7,57	2,79
A_SGM1	-0,1	43,8	n,b,	<0,01	2,49	7	2,49	1,58
A_SGM3	-10	118,0	n,b,	<0,01	1,03	9	1,03	0,51

[1)]bzgl. Druckspiegel, [2)]siehe Anhang 6, [3)]Grundwasseralter; Wehnsen: ROGGE (2006), mdl. Mitteilung, Sulingen: GERIES (2005) mdl. Mitteilung, Thülsfelde: WALTHER et al. (2002), [a)]MEON et a. (2005)

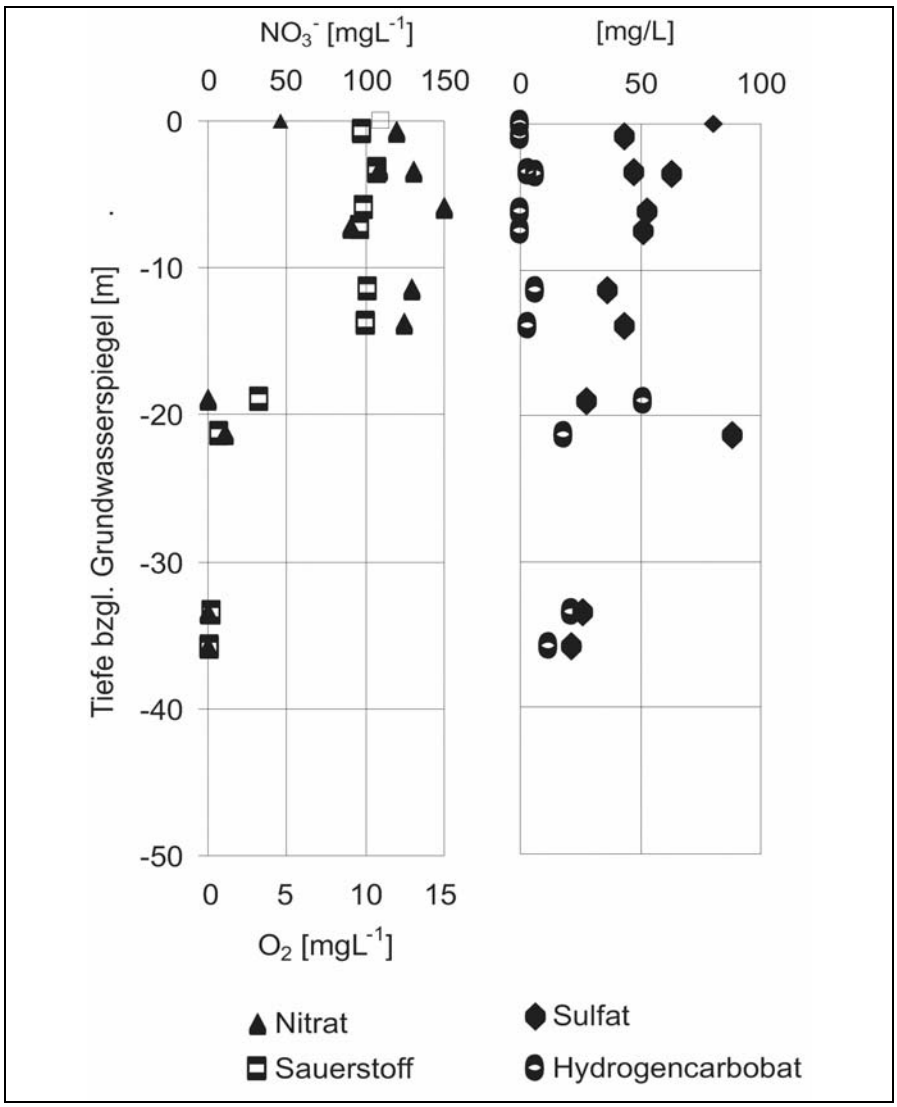


Abbildung A3-6: Tiefenprofile ausgewählter Parameter im Gebiet Sulingen, Oktober 2004

Tabelle A3- 5: Korrelationskoeffizienten nach Spearman

	N_2O	N_2/Ar	GW	pH	Eh	HCO_3^-	O_2	Ca^{++}	Cl^-	Fe_{ges}	K^+	Mg^{++}	Mn_{ges}	Na^{++}	NO_3^-	SO_4^{--}	
N_2O		-.43*	-.43	-.40	.44*	-.40	.32	.14	$.40_{23}$	**$-.56^{**}_{23}$**	**.52***	.39	$-.40_{23}$	.14	**$.56^{**}_{23}$**	$.24_{23}$	N_2O
N_2/Ar	$-.20_{26}$		$.14_{20}$	**$.69^{**}_{19}$**	**$-.72^{**}_{19}$**	**$.56^{**}_{19}$**	**$-.70^{**}_{19}$**	$-.02_{20}$	**$-.52^{*}_{21}$**	**$.59^{**}_{21}$**	$-.38_{20}$	**$-.62^{**}_{20}$**	.30	-.11	**-.61****	$-.28_{21}$	N_2/Ar
GW	$-.28_{26}$	-.06		$.16_{19}$	$-.03_{19}$	$-.04_{19}$	$-.01_{19}$	-.01	.01	.19	-.14	.12	.09	-.23	-.11	-.17	GW
pH	$-.08_{26}$	-.27	.27		**$-.80^{**}_{22}$**	**$.88^{**}_{22}$**	**$-.71^{**}_{21}$**	$.10_{19}$	$-.45_{22}$	$.34_{22}$	$-.23_{19}$	**$-.82^{**}_{19}$**	$.09_{22}$	$.07_{19}$	**$-.67^{**}_{22}$**	$-.10_{22}$	pH
Eh	--	--	--	--		**$-.77^{**}_{22}$**	**$.78^{**}_{22}$**	$.06_{19}$	$.46^{*}_{22}$	**$-.57^{**}_{22}$**	**$.54^{*}_{19}$**	**$.82^{**}_{19}$**	$-.39_{22}$	$-.01_{19}$	**$.78^{**}_{22}$**	$.02_{22}$	Eh
HCO_3^-	$-.14_{26}$	-.26	$.27_{29}$	**$.77^{**}_{29}$**	--		**$-.61^{**}_{22}$**	$.13_{19}$	$-.40_{22}$	$.25_{22}$	$-.26_{19}$	**$-.69^{**}_{19}$**	$.17_{22}$	$.21_{19}$	**$-.56^{**}_{22}$**	$.01_{22}$	HCO_3^-
O_2	**$.63^{*}_{26}$**	**-.58****	-.17	.06	--	$-.30_{29}$		$.22_{19}$	**$.71^{**}_{22}$**	$-.42_{22}$	$.43_{19}$	**$.89^{**}_{19}$**	$-.37_{22}$	$.13_{19}$	**$.82^{**}_{22}$**	$.34_{22}$	O_2
Ca^{++}	$-.04_{26}$	.17	-.36*	-.17	--	$-.26_{29}$	.09		**.58****	-.09	**.72****	.42	-.35	**.69****	.43	**.69****	Ca^{++}
Cl^-	$.03_{26}$	.09	.38*	-.11	--	$-.17_{29}$	.11	.29		$-.20_{24}$	**.66****	**.75****	$-.25_{24}$	.47*	**$.73^{**}_{24}$**	**$.54^{**}_{24}$**	Cl^-
Fe_{ges}	**$-.83^{**}_{26}$**	.45**	.26	-.24	--	$.15_{29}$	**-.74****	-.19	.01		-.37	-.41	**$.65^{**}_{24}$**	-.13	**$-.51^{*}_{24}$**	$-.30_{24}$	Fe_{ges}
K^+	$.18_{26}$	.30	**-.68****	-.31	--	$-.42_{29}$	.04	**.51****	-.31	-.23		.55*	**-.61****	**.52***	**.63****	**.59****	K^+
Mg^{++}	$.24_{26}$	.32	-.15	-.20	--	$-.22_{29}$	.05	.44*	.43*	.04	.12		-.26	.30	**.90****	**.56****	Mg^{++}
Mn_{ges}	$-.21_{26}$	**.56****	-.20	-.28	--	$-.37_{29}$	-.23	**.50****	.19	.22	.38*	.48**		-.08	$-.35_{24}$	$-.39_{24}$	Mn_{ges}
Na^{++}	$-.23_{26}$	.02	**.67****	.01	--	$.09_{29}$	-.14	.02	.78**	.30	**-.52****	.14	.11		.24	**.54***	Na^{++}
NO_3^-	**$.75^{**}_{26}$**	-.37*	-.46**	-.13	--	$-.33_{29}$	.71**	.44*	.13	**-.77****	.37*	.27	-.02	-.23		$.33_{24}$	NO_3^-
SO_4^{--}	$-.38_{26}$	**.72****	-.22	-.30	--	$-.22_{29}$	-.53	.45**	-.03	-.47**	.42*	.47**	**.78****	-.06	-.31		SO_4^{--}
	N_2O	N_2/Ar	GW	pH	Eh	HCO_3^-	O_2	Ca^{++}	Cl^-	Fe_{ges}	K^+	Mg^{++}	Mn_{ges}	Na^{++}	NO_3^-	SO_4^{--}	

Korrelationskoeffizienten nach Spearman (r_s): rechte, obere Hälfte: für das Gebiet Wehnsen, linke, untere Hälfte für das Gebiet Thülsfelde (alle Fassungen)

**Die Korrelation ist auf dem 0,01 Niveau signifikant (zweiseitig), *Die Korrelation ist auf dem 0,05 Niveau signifikant (zweiseitig)

Tiefgestellte Ziffern: Anzahl n der Datenpaare, wenn n ≠ 21(Wehnsen), bzw. wenn n ≠ 33(Thülsfelde)

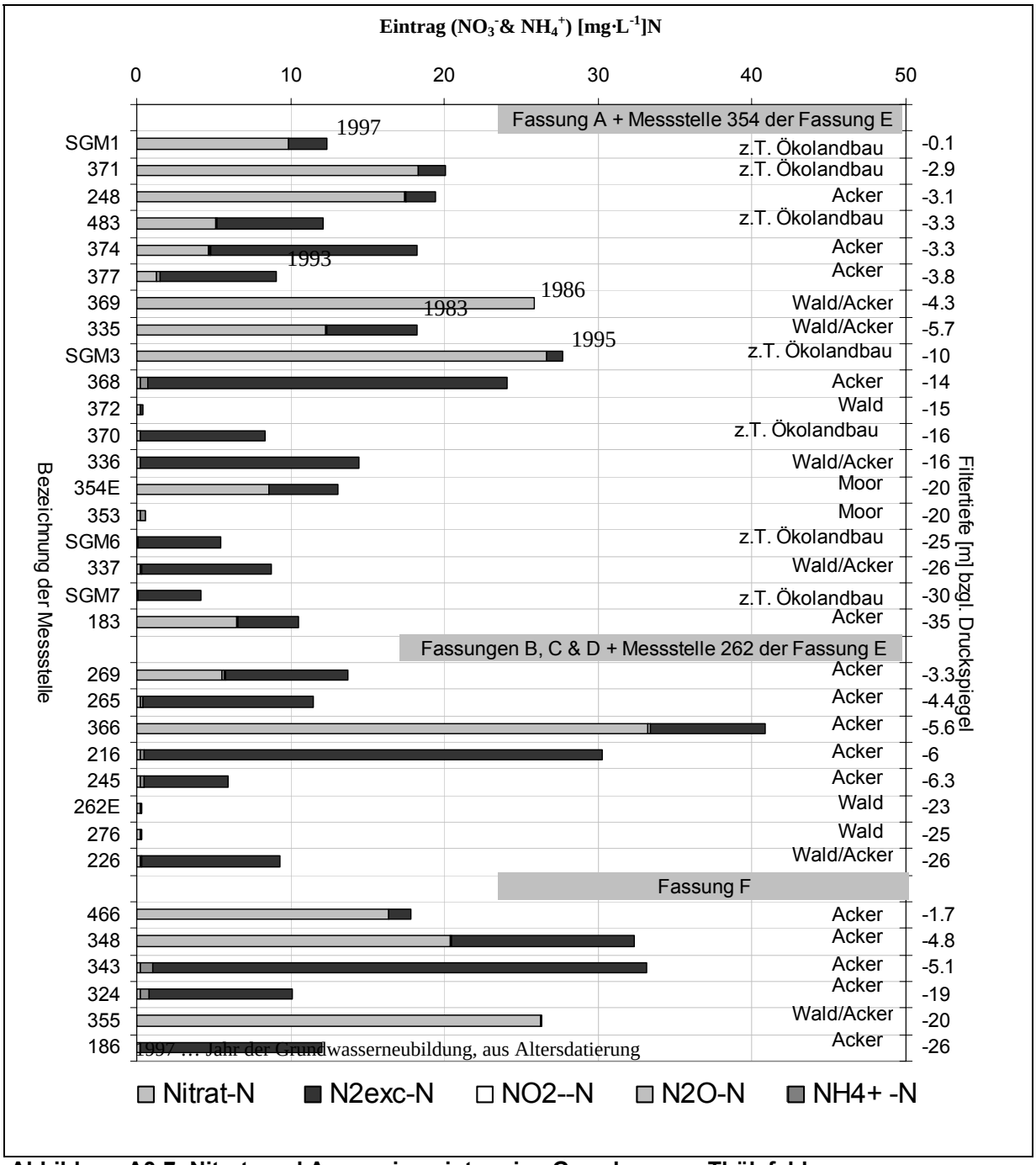
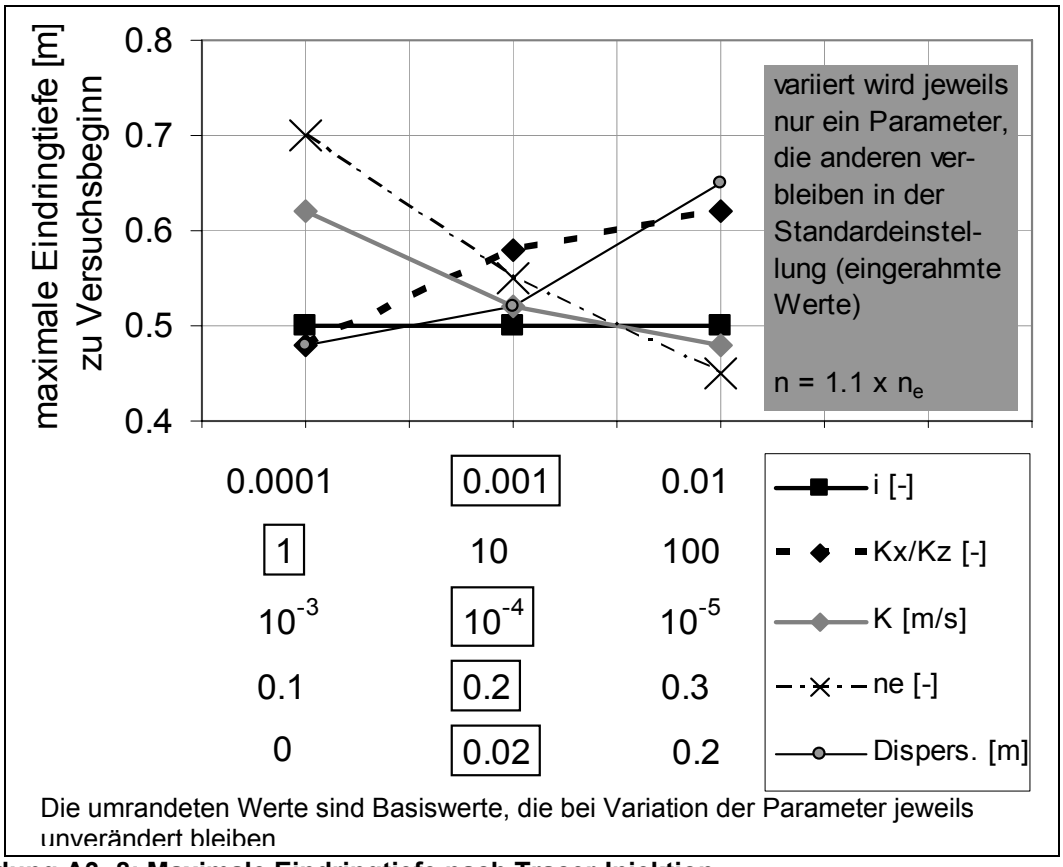


Abbildung A3-7: Nitrat- und Ammoniumeintrag ins Grundwasser, Thülsfelde

Tabelle A3- 6: Kenngrößen des numerischen Modells, Verhalten der Injektionslösung

Verfahren:	**Finite-Differenzen-Methode**
	3D / instationär
Modellausdehnung	x = y = z = 4m
Aquifer	ungespannt, homogen
Diskretisierung	horizontal: zwischen 0,1 und 0,2 m, vertikal: zwischen 0,1 und 0,2 m
Eingangsparameter, variiert[1)]	
i [-]	0.0001, 0.001, 0.01
$K_{x,y}$ [m/s]	10^{-5} , 10^{-4}, 10^{-3} m/s
$K_{x,y}/K_z$ [-]	100, 10 ,1
n_e [-]	0,1 , 0,2, 0,3
n [-]	0,11, 0,22, 0,33
α_L [m]	0, 0,02, 0,2
Grundwasserneubildung [mm/a]	200
Berandung	(1. Art) x(0m) = 30m, x(4m) = 30m – (4m · i) (2. Art) y(0m) = 0L/T, y(4m) = 0L/T
Konzentration	Punktquelle, 2. Art ("point source")
Software	VISUALMODFLOW (Strömung), McDONALD & HARBAUGH (1988) MT3D (Transport), ZHENG & WANG (1998)

[1)]siehe Kapitel 5.2.2.3, Abschnitt „Numerische Berechnung des Verhaltens der Injektionslösung"



Die umrandeten Werte sind Basiswerte, die bei Variation der Parameter jeweils unverändert bleiben

Abbildung A3- 8: Maximale Eindringtiefe nach Tracer-Injektion

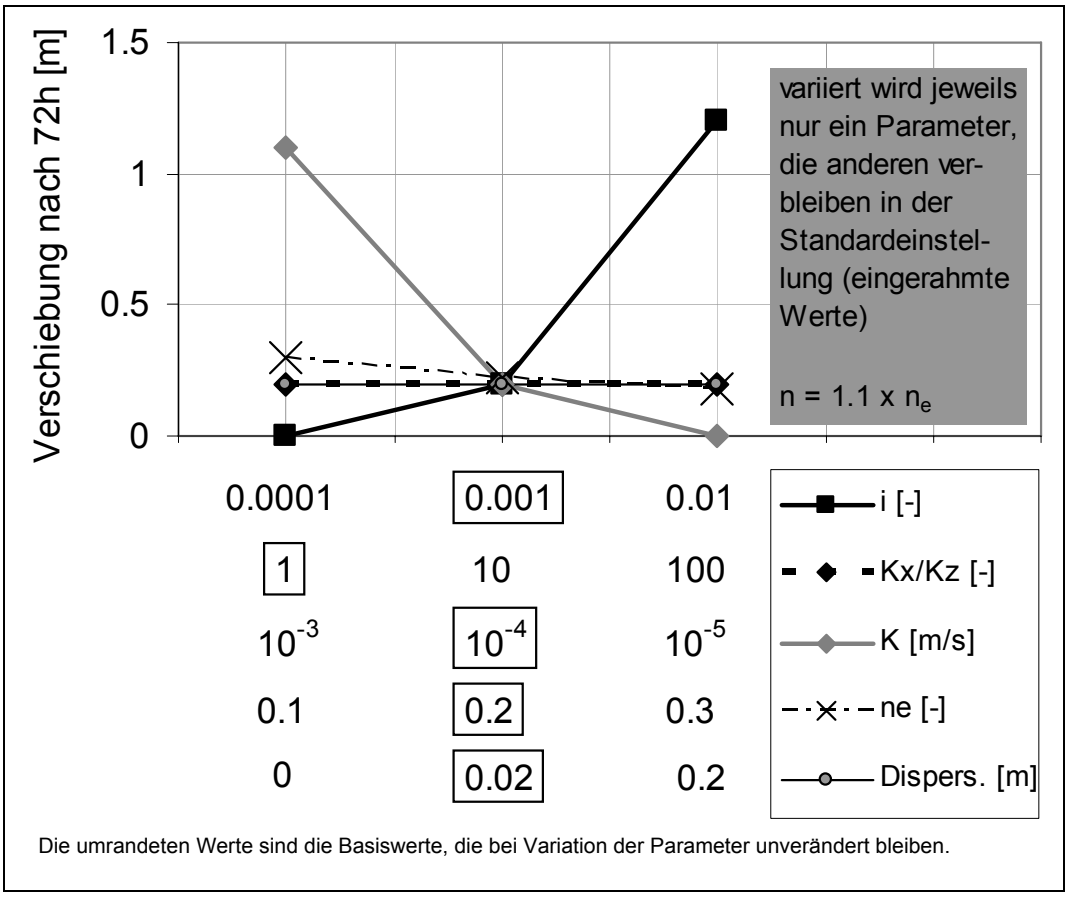


Abbildung A3- 9: Maximale Verschiebung des Konzentrationsmaximums nach einer Versuchsdauer von 72h

Tabelle A3- 7: Messwerte aus den Tracerversuchen in Wehnsen, September 2004

Messstelle		W2123	W2113	W2113W[1)]	W2122	W2009	W2112	W2012	
Zeit-punkt	Para-meter								
0h	NO_3^-	19,13	0,97	0,42	86,7	18,76	33,15	<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
Tracer	NO_3^-	69,6	45	41,26	138,8	62,8	77,15	46,46	$mg \cdot l^{-1}$
24h	NO_3^-	22,99	34,69	28,84	120	60,7	57,33	24,4	$mg \cdot l^{-1}$
36h	NO_3^-	23,19	30,31		113,3	57,9			$mg \cdot l^{-1}$
48h	NO_3^-	23,35	23,32	18,83	99,8	57	56,84	7,57	$mg \cdot l^{-1}$
60h	NO_3^-	22,42	16,77		100,1			1,79	$mg \cdot l^{-1}$
72h	NO_3^-	22,36	11,09		93,7		49,49	0,43	$mg \cdot l^{-1}$
90h	NO_3^-			5,45					$mg \cdot l^{-1}$
100h	NO_3^-			3,16					$mg \cdot l^{-1}$
0h	Br^-	0,2	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
Tracer	Br^-	10,7	10	21,35	12,1	4,6		9,76	$mg \cdot l^{-1}$
24h	Br^-	0,49	6,25	16,64	9,3	2	3,28	6,1	$mg \cdot l^{-1}$
36h	Br^-	0,36	6,23		7,6	2,5			$mg \cdot l^{-1}$
48h	Br^-	0,29	4,68	12,32	4,7	2,9	2,65	2,05	$mg \cdot l^{-1}$
60h	Br^-	0,24	3,45	10,17	3,2			0,72	$mg \cdot l^{-1}$
72h	Br^-	0,21	2,66	8,02	2,2		1,26	0,43	$mg \cdot l^{-1}$
90h	Br^-			5,87					$mg \cdot l^{-1}$
100h	Br^-			4,64					$mg \cdot l^{-1}$
0h	O_2	0,18	<0,1	<0,1	3	<0,1	1,72	<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
24h	O_2	<0,1	4,4	0,3	0,87	<0,1	0,7	0,9	$mg \cdot l^{-1}$
36h	O_2	<0,1	2,3		0,26	<0,1			$mg \cdot l^{-1}$
48h	O_2	<0,1		0,15	0,2	<0,1	3,7	1,7	$mg \cdot l^{-1}$
60h	O_2	<0,1			<0,1			<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
72h	O_2	<0,1	<0,1		<0,1		<0,1	<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
90h	O_2			<0,1					$mg \cdot l^{-1}$

100h	O_2			<0,1					$mg \cdot l^{-1}$

Tabelle A3-7: Messwerte aus den Tracerversuchen in Wehnsen, September 2004

- Fortsetzung -

Messstelle		W2123	W2113	W2113W[1)]	W2122	W2009	W2112	W2012	
Zeit-punkt	Para-meter								
0h	pH	4,94	7,24	6,97	6,55	7,17	6,78	6,65	
24h	pH	4,96	6,73	7	6,88	6,06	6,51	5,89	
36h	pH	7,02	7,2		6,93	6,09			
48h	pH	6,92		7,46	6,92		6,68	7,12	
60h	pH	5,1			6,91			7,3	
72h	pH	5,3	5,85				6,1	6,92	
90h	pH			7,55					
100h	pH			7,47					
0h	Eh	290	-88	-103	77	138	169	37	mV
24h	Eh	315		25	52	228	251	173	mV
36h	Eh	318			46	211			mV
48h	Eh	314		38	35		233	197	mV
60h	Eh	308		36,2	43			170	mV
72h	Eh	308	-15	34,8			270	130	mV
90h	Eh			33					mV
100h	Eh			24					mV
0h	NO_2^-	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	$mg \cdot l^{-1}$
24h	NO_2^-	<0,01	0,24	0,82	0,37	<0,01	0,27	0,89	$mg \cdot l^{-1}$
36h	NO_2^-	<0,01	0,31		0,37	<0,01			$mg \cdot l^{-1}$
48h	NO_2^-	<0,01	0,35	0,61	0,35	<0,01	0,31	0,23	$mg \cdot l^{-1}$
60h	NO_2^-	<0,01	0,45	*0,71*	0,32				$mg \cdot l^{-1}$
72h	NO_2^-	<0,01	0,46	*0,81*	0,33		0,33		$mg \cdot l^{-1}$
90h	NO_2^-			0,93					$mg \cdot l^{-1}$
100h	NO_2^-			0,82					$mg \cdot l^{-1}$
0h	N_2O-N	n.n.	n.n.		n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
24h	N_2O-N	n.n.	123		n.n.	n.n.		n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
36h	N_2O-N	n.n.	105		n.n.	n.n.		n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
48h	N_2O-N	n.n.	89,14		n.n.	n.n.		n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
60h	N_2O-N	n.n.	36,36		n.n.			n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
72h	N_2O-N	n.n.	45,04		n.n.			n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
0h	N_{2_Deni}-N	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
24h	N_{2_Deni}-N	7,7	482	338,92	54,67	13	38,4	312,5	$\mu g \cdot l^{-1}$
36h	N_{2_Deni}-N	39,57	553		161,1	98			$\mu g \cdot l^{-1}$
48h	N_{2_Deni}-N	60,11	947	635,53	209,9	218	323	393,4	$\mu g \cdot l^{-1}$
60h	N_{2_Deni}-N	60,91	851	*864,52*	174,2			373,3	$\mu g \cdot l^{-1}$
72h	N_{2_Deni}-N	60,9	788	*1093,5*	200,3		921	320	$\mu g \cdot l^{-1}$
90h	N_{2_Deni}-N			1322,5					$\mu g \cdot l^{-1}$
100h	N_{2_Deni}-N			1567,9					$\mu g \cdot l^{-1}$
0h	SO_4^{2-}	100,5	127,58	135,22	145,1	47,8	51,38	76,75	$mg \cdot l^{-1}$
24h	SO_4^{2-}	100,31	125,96	135,46	145,3	73,4	59,56	76,75	$mg \cdot l^{-1}$
36h	SO_4^{2-}	99,06	125,12		146,8	72,9			$mg \cdot l^{-1}$
48h	SO_4^{2-}	100,38	123,67	135,76	147,8	70,7	62,92	76,78	$mg \cdot l^{-1}$
60h	SO_4^{2-}	101,42	124,46		149,5			76,81	$mg \cdot l^{-1}$
72h	SO_4^{2-}	101,08	123,97		148,3		62,34	77,65	$mg \cdot l^{-1}$
90h	SO_4^{2-}			135,57					$mg \cdot l^{-1}$
100h	SO_4^{2-}			135,27					$mg \cdot l^{-1}$
0h	HCO_3^-	6,83	101,1	107,4	64,07	21,4	132,41	75,966	$mg \cdot l^{-1}$
24h	HCO_3^-	6,83		103,5	62,237	21,36	112,64	73,22	$mg \cdot l^{-1}$
36h	HCO_3^-					21,4			$mg \cdot l^{-1}$
48h	HCO_3^-	7,93		105,5	54,915		108	73,22	$mg \cdot l^{-1}$
60h	HCO_3^-	7,93						73,2	$mg \cdot l^{-1}$
72h	HCO_3^-	7,93	108,1				97,627	73,22	$mg \cdot l^{-1}$

90h	HCO_3^-			102,5					$mg \cdot l^{-1}$

[1)]Wiederholungsversuch, Oktober 2005, Eh…Redoxpotential

Tabelle A3- 8: Messwerte aus den Tracerversuchen in Sulingen (S) und Thülsfelde[4)] (T)

	Messstelle	S123[1)]	S128[1)]	T483[2)]	T370[2)]	T336[2)]	T370W[3)]	
Zeitpunkt	Parameter							
0h	NO_3^-	4,62	0,87	38,7	0,8	n.n.	n.n.	$mg \cdot l^{-1}$
Tracer	NO_3^-	32	32,14	81,1	61,9	55,5	45	$mg \cdot l^{-1}$
24h	NO_3^-	43,1	23,58	72,5	40,8	29,6	45	$mg \cdot l^{-1}$
36h	NO_3^-	36,61	22,05	65,9	24,2	23,5	*38*	$mg \cdot l^{-1}$
48h	NO_3^-	21,87	20,66	60,5	20,4	8,3		$mg \cdot l^{-1}$
60h	NO_3^-	16,53	17,84				26	$mg \cdot l^{-1}$
72h	NO_3^-	12	16,48					$mg \cdot l^{-1}$
90h	NO_3^-						9,12	$mg \cdot l^{-1}$
0h	Br^-	0,2	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	$mg \cdot l^{-1}$
Tracer	Br^-	10	10	9,8	13,3	12,7	10	$mg \cdot l^{-1}$
24h	Br^-	8,79	5,08	7,8	9,8	7,1	9,94	$mg \cdot l^{-1}$
36h	Br^-	7,45	4,78	5,3	7	2,7		$mg \cdot l^{-1}$
48h	Br^-	4,35	4,87	4,5	5	2,3	7,03	$mg \cdot l^{-1}$
60h	Br^-	3,04	4,29				5,89	$mg \cdot l^{-1}$
72h	Br^-	2,05	3,5					$mg \cdot l^{-1}$
90h	Br^-						2,28	$mg \cdot l^{-1}$
0h	O_2	<0,1	<0,1	1,86			0,02	$mg \cdot l^{-1}$
24h	O_2	3,1	2,55	3,2			<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
36h	O_2	2,7	<0,1	<0,1			<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
48h	O_2	<0,1	<0,1	<0,1			<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
60h	O_2	<0,1	<0,1				<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
72h	O_2	<0,1	<0,1				<0,1	$mg \cdot l^{-1}$
0h	pH	5,8	6,75	5,1	4,57	5,4		
24h	pH	5,93	6,83	5,2	4,58	5,2		
36h	pH	6,42	7,94	5,6	4,55	5,15		
48h	pH	5,96		5,4	4,8	5,08		
60h	pH	6,24						
72h	pH	6,08						
0h	Eh	-43	7	233	144	47		mV
24h	Eh	104	47	270	352	182		mV
36h	Eh	93	51	233	390	179		mV
48h	Eh	105	105	233	309	172		mV
60h	Eh	137	137					mV
72h	Eh	108	108					mV
0h	NO_2^-	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	$mg \cdot l^{-1}$
24h	NO_2^-	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	$mg \cdot l^{-1}$
36h	NO_2^-	0,49	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01		$mg \cdot l^{-1}$
48h	NO_2^-	0,47	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01		$mg \cdot l^{-1}$
60h	NO_2^-	0,53	<0,01					$mg \cdot l^{-1}$
72h	NO_2^-	0,19	<0,01					$mg \cdot l^{-1}$

[1)]Oktober 2004, [2)]Juni/Juli 2003, [3)]Juli 2004 (Wiederholungsversuch), [4)]Stammdaten in Tabelle A6-6, Anlage6

Tabelle A3- 8: Messwerte aus den Tracerversuchen in Sulingen (S) und Thülsfelde (T) - Fortsetzung -

	Messstelle	S123[1)]	S128[1)]	T483[2)]	T370[2)]	T336[2)]	T370W[3)]	
Zeitpunkt	Parameter							
0h	N_2O-N	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.		$\mu g \cdot l^{-1}$
24h	N_2O-N	n.n.	n.n.	7,89	18,91	5,3		$\mu g \cdot l^{-1}$
36h	N_2O-N	n.n.	n.n.	0,45	27,11	3,36		$\mu g \cdot l^{-1}$
48h	N_2O-N	n.n.	n.n.	11,9	32,05	3,71		$\mu g \cdot l^{-1}$
60h	N_2O-N	13,089	n.n.					$\mu g \cdot l^{-1}$
72h	N_2O-N	19,11						$\mu g \cdot l^{-1}$
0h	N_{2_Deni}-N	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	$\mu g \cdot l^{-1}$
24h	N_{2_Deni}-N	16	2,12	0	5,54	3,88	45,18	$\mu g \cdot l^{-1}$
36h	N_{2_Deni}-N	19,3	3,9	3,3	18,85	6,9	62,09	$\mu g \cdot l^{-1}$
48h	N_{2_Deni}-N	42,7	10,1	4,93	61	10,5	79	$\mu g \cdot l^{-1}$
60h	N_{2_Deni}-N	43,8	13,8				93	$\mu g \cdot l^{-1}$
72h	N_{2_Deni}-N	53,6					107	$\mu g \cdot l^{-1}$
90h	N_{2_Deni}-N						82	$\mu g \cdot l^{-1}$
0h	SO_4^{2-}	72,4	21,33	41,5	113,5	156		$mg \cdot l^{-1}$
24h	SO_4^{2-}	71,46	20,35	40,5	109,8	150,7	120	$mg \cdot l^{-1}$
36h	SO_4^{2-}	71,28	20,29	40,8	106,8	153,8		$mg \cdot l^{-1}$
48h	SO_4^{2-}	70,97	20,51	34,9	112	156	122	$mg \cdot l^{-1}$
60h	SO_4^{2-}	70,9	20,51					$mg \cdot l^{-1}$
72h	SO_4^{2-}	71,12	20,36				119	$mg \cdot l^{-1}$
90h	SO_4^{2-}						130	$mg \cdot l^{-1}$
0h	HCO_3^-	23,797	67,119	10,4	4,3	11,2		$mg \cdot l^{-1}$
24h	HCO_3^-	27,458	67,119	16,4	4,5	10,2		$mg \cdot l^{-1}$
36h	HCO_3^-	23,919	70,17	19,9	4,3	10,83		$mg \cdot l^{-1}$
48h	HCO_3^-	22,576	67,119	21,5	4,3	10,3		$mg \cdot l^{-1}$
60h	HCO_3^-	25,017	67,119					$mg \cdot l^{-1}$
72h	HCO_3^-	25,017	67,119					$mg \cdot l^{-1}$

[1)]Oktober 2004, [2)]Juni/Juli 2003, [3)]Juli 2004 (Wiederholungsversuch)

Tabelle A3- 9: Konzentrationen ausgewählter Parameter an den in situ Versuchen[1)]

	$\beta(t_o)$	$\beta(t_o)$	$\beta(t_o)$	$\beta(t_i)$[1)]	$\beta(t_i)$[1)]	$\beta(t_i)$[1)]	$\beta(t_i) - \beta(t_o)$			
	NH_4^+	Fe_{ges}	Mn_{ges}	NH_4^+	Fe_{ges}	Mn_{ges}	NH_4^+	Fe_{ges}	Mn_{ges}	
W2123	0,03	<0,2	<0,1	0,08	<0,2	<0,1	0,05			$mg \cdot l^{-1}$
W2113	<0,0125	0,36	0,31	0,16	0,23	0,28	0,16	-0,13	-0,03	$mg \cdot l^{-1}$
W2122	<0,0125	3,9	0,55	<0,0125	<0,2	0,35		-3,9	-0,2	$mg \cdot l^{-1}$
W2009	<0,0125	<0,2	<0,1	<0,0125	<0,2	<0,1				$mg \cdot l^{-1}$
W2112	<0,0125	<0,2	<0,1	<0,0125	<0,2	<0,1				$mg \cdot l^{-1}$
W2012	<0,0125	0,6	0,33	<0,0125	<0,2	0,2		-0,4	-0,13	$mg \cdot l^{-1}$
S123	0,04	<0,2	0,36	0,014	<0,2	0,17	-0,026		-0,19	$mg \cdot l^{-1}$
S128	<0,0125	<0,2	0,08	0,03	<0,2	0,07	0,03		-0,01	$mg \cdot l^{-1}$
T483	0,021	<0,2	<0,1	0,049	<0,2	<0,1	0,028			$mg \cdot l^{-1}$
T370	0,059	4,6	0,3	0,051	0,4	0,2	-0,008	-4,2	-0,1	$mg \cdot l^{-1}$
T336	0,05	19	0,5	0,044	22	0,6	-0,006	3	0,1	$mg \cdot l^{-1}$

[1)] zu Versuchsbeginn $\beta(t_o)$ und am Versuchsende $\beta(t_i)$ mit Angabe der Differenz der Konzentrationen
t_i = 72 h (für Wehnsen [W] und Sulingen [S]), t_i = 48 h (für Thülsfelde [T])

Tabelle A3- 10: Korrigierte Daten von $\beta_{N2\_Deni}(t)$, $\beta_{N2O}(t)$ und $\beta_{NO2}(t)$

Messstelle		W2123	W2113	W2113W	W2122	W2012	W2009	W2112	
Parameter_t_i [h]									
N_{2_Deni}	24	168,1	771,2	434,9	71,1	500,0	29,9	117,1	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	36	1176,1	887,6	718,4[1)]	256,5	845,3[1)]	180,3	609,4[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	48	2217,9	2023,5	1101,4	540,4	1873,0	345,8	1218,9	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	60	2715,6	2466,7	1814,9	658,7	5060,3		3181,6[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	72	3103,0	2962,4	2911,0[1)]	1101,7	7263,3		7309,5	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	100			7214,4					$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	24	0	196,8		0	0	0		$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	36	0	168,5		0	0	0		$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	48	0	190,5		0	0	0		$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	60	0	105,4		0	0			$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	72	0	169,34		0	0			$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	100								$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	24		116,9	320,2	146,5	433,4		250,5	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	36		151,4	320,9[1)]	179,3	408,2[1)]		297,7[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	48		227,6	321,7	274,2	333,3		356,0	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	60		397,0		368,3			498,2[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	72		526,3		552,4			797,1	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	100			1148,3					$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	24	168,1	1084,9	755,1	217,6	933,4	29,9	367,6	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	36	1176,1	1207,6	1039,2[1)]	435,8	1253,6[1)]	180,3	907,1[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	48	2217,9	2441,6	1423,1	814,6	2206,2	345,8	1574,9	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	60	2715,6	2969,0	1814,9	1027,0	5060,3		3679,8[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	72	3103,0	3658,0	2911,0[1)]	1654,0	7263,3		8106,6	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	100			8232,7					$\mu g \cdot l^{-1}$ N
Messstelle		S128	S123		T483	T370	T336	T370W	
Parameter_ti [h]									
N_{2_Deni}	24	4,2	18,2		0,0	7,5	6,9	45,5	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	36	8,2	25,9		6,1	35,8	32,5	73,2[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	48	20,7	98,2		10,7	162,3	58,0	112,4	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	60	32,2	144,1					157,9	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	72		261,5					225,3	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_{2_Deni}	90							360,0	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	24	0	0		9,9	25,7	9,5	0	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	36	0	0		0,8	51,5	15,8	0[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	48	0	0		25,9	85,3	20,5	0	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	60	0	43,1					43,1	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	72		93,2					93,2	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
N_2O	90								$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	24	0	0,0						$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	36	0	200,2						$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	48	0	328,8						$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	60	0	530,6						$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	72	0	282,1						$\mu g \cdot l^{-1}$ N
NO_2^-	90								$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	24	4,2	18,2		9,9	33,2	16,4	45,5	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	36	8,2	226,1		6,9	87,3	48,3	73,2[1)]	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	48	20,7	427,0		36,7	247,5	78,5	112,4	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	60	32,2	717,7					157,9	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	72		636,8					225,3	$\mu g \cdot l^{-1}$ N
D	90							360,0	$\mu g \cdot l^{-1}$ N

[1)] Werte wurden auf der Basis linear interpolierter Konzentrationen mit Messwerten aus Tabelle A3-7 und A3-8 bestimmt

Tabelle A3- 11: Daten in situ- und Laborversuch für Vergleich, Teil (1)

		in situ	in situ[1)]	in situ[2)]	in situ[3)]	Labor[5)]	Labor[5)]	Labor[6)]
Messstelle		W2123	W2123	minimal	maximal	W3	W4	W340, n_{ges} = 0,2
Parameter_t_i [h]		µg·l^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N
N_{2_Deni}	24	168,1	0,02	0,02	0,04	0,20	0,19	0,0045
N_{2_Deni}	36	1176,1	0,11	0,11	0,29			0,0158
N_{2_Deni}	48	2217,9	0,21	0,21	0,56	0,28	0,25	0,0198
N_{2_Deni}	60	2715,6	0,26	0,26	0,68			0,0446
N_{2_Deni}	72	3103	0,29	0,29	0,78			0,0092
N_2O	24	0,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0	0,0003
N_2O	36	0,0	0,00	0,00	0,00			0,0009
N_2O	48	0,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0	0,0008
N_2O	60	0,0	0,00	0,00	0,00			0,0009
N_2O	72	0	0,00	0,00	0,00			0,0016
NO_2^-	36							0,00
NO_2^-	48					0,00	0,00	0,08
NO_2^-	60							0,24
NO_2^-	72							0,28
D	24	168,1	0,02	0,02	0,04	0,20	0,19	0,00
D	36	1176,1	0,11	0,11	0,29			0,02
D	48	2217,9	0,21	0,21	0,56	0,28	0,25	0,10
D	60	2715,6	0,26	0,26	0,68			0,29
D	72	3103,0	0,29	0,29	0,78			0,29
		in situ	in situ[4)]	in situ[2)]	in situ[3)]	Labor[5)]	Labor[5)]	Labor[6)]
Messstelle		W2122	W2122	minimal	maximal	W1	W2	W120, n_{ges} = 0.3
Parameter_t_i [h]		µg·l^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N
N_{2_Deni}	24	71,1	0,01	0,01	0,02	0,0057	0,0162	0,0136
N_{2_Deni}	36	256,5	0,04	0,02	0,06			0,1375
N_{2_Deni}	48	540,4	0,09	0,05	0,14	0,0327	0,1068	0,1639
N_{2_Deni}	60	658,7	0,11	0,06	0,17			0,2742
N_{2_Deni}	72	1101,7	0,18	0,10	0,28			0,2849
N_2O	24	0,0	0,00	0,00	0,00	0	0	0,0012
N_2O	36	0,0	0,00	0,00	0,00			0,0034
N_2O	48	0,0	0,00	0,00	0,00	0	0	0,0033
N_2O	60	0,0	0,00	0,00	0,00			0,0055
N_2O	72	0	0,00	0,00	0,00			0,0063
NO_2^-	24	146,5	0,02	0,01	0,04			
NO_2^-	36	179,3	0,03	0,02	0,04			0
NO_2^-	48	274,2	0,04	0,03	0,07	0	0	0
NO_2^-	60	368,3	0,06	0,03	0,09			0,153
NO_2^-	72	552,4	0,09	0,05	0,14			0,007
D	24		0,00	0,00	0,00			
D	36	217,6	0,04	0,02	0,05	0,0057	0,0162	0,0148
D	48	435,8	0,07	0,04	0,11			0,1409
D	60	814,6	0,13	0,08	0,20	0,0327	0,1068	0,1672
D	72	1027,0	0,17	0,10	0,26			0,2797

[1)]n_{ges} = 0,2 [2)]n_{ges} = 0,2 [3)]n_{ges} = 0,5 [4)]n_{ges} = 0,3, [5)]Die Werte werden nicht in den Vergleich einbezogen, da keine komplette, lückenlose Zeitreihe vorliegt. Die Werte stehen dennoch in dieser Tabelle, um einen Vergleich mit den Daten des Versuches aus der Mischprobe zu ermöglichen. [6)]Datensatz für Vergleich

Tabelle A3-11: Daten in situ- und Laborversuch für Vergleich, Teil (2)

		in situ	in situ[1)]	in situ[1)]	in situ[2)]	Labor[3)]	Labor[3)]	Labor[4)]
Messstelle		W2113	W2113	minimal	maximal	W7	W8	W780, n_{ges} = 0.16
Parameter_t_i [h]		µg·l^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N
N_{2_Deni}	24	771,2	0,06	0,07	0,19	0,1958	0,1781	0
N_{2_Deni}	36	887,6	0,06	0,08	0,22			0,0006
N_{2_Deni}	48	2023,5	0,14	0,19	0,51	0,2736	0,1972	0,0008
N_{2_Deni}	60	2466,7	0,18	0,23	0,62			0,0002
N_{2_Deni}	72	2962,4	0,21	0,28	0,74			0,082
N_2O	24	196,8	0,01	0,02	0,05	0	0	0,0011
N_2O	36	168,5	0,01	0,02	0,04			0,0537
N_2O	48	190,5	0,01	0,02	0,05	0	0	0,0616
N_2O	60	105,4	0,01	0,01	0,03			0,145
N_2O	72	169,3	0,01	0,02	0,04			0,145
NO_2^-	24	116,9	0,01	0,01	0,03			
NO_2^-	36	151,4	0,01	0,01	0,04			0
NO_2^-	48	227,6	0,02	0,02	0,06	0	0	0
NO_2^-	60	397,0	0,03	0,04	0,10			0
NO_2^-	72	526,3	0,04	0,05	0,13			0
D	24	1084,9	0,08	0,10	0,27	0,1958	0,1781	0,0011
D	36	1207,6	0,09	0,11	0,30			0,0543
D	48	2441,6	0,17	0,23	0,61	0,2736	0,1972	0,0624
D	60	2969,0	0,21	0,28	0,74			0,1451
D	72	3658,0	0,26	0,34	0,92			0,227
		in situ	in situ[1)]	in situ[1)]	in situ[2)]	Labor[3)]	Labor[3)]	Labor[4)]
Messstelle		W2113W	W2113W	minimal	maximal	W7	W8	W780 n_{ges} = 0.16
Parameter_t_i [h]		µg·l^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N	mg·kg^{-1} N
NO_2^-	24	320,2	0,02	0,03	0,08			
NO_2^-	36	320,9	0,02	0,03	0,08			0
NO_2^-	48	321,79	0,02	0,03	0,08	0	0	0
NO_2^-	60	368,3	0,06	0,03	0,09			0
NO_2^-	72	552,4	0,09	0,05	0,14			0
D	24	755,1	0,05	0,07	0,19	0,1958	0,1781	0,0011
D	36	1039,2	0,07	0,10	0,26			0,0543
D	48	1423,1	0,10	0,13	0,36	0,2736	0,1972	0,0624
D	60	1814,9	0,13	0,17	0,45			0,1451
D	72	2911,0	0,21	0,27	0,73			0,227

[1)] n_{ges} = 0,16 [2)] n_{ges} = 0,5, [3)] Die Werte werden nicht in den Vergleich einbezogen, da keine komplette, lückenlose Zeitreihe vorliegt. Die Werte stehen dennoch in dieser Tabelle, um einen Vergleich mit den Daten des Versuches aus der Mischprobe zu ermöglichen. [4)] Datensatz für Vergleich

Tabelle A3-11: Daten in situ- und Laborversuch für Vergleich, Teil (3)

		in situ[1)]	in situ[2)]	in situ[3)]	Labor[4)]	in situ[1)]	in situ[2)]	in situ[3)]	Labor[1)]
Messstelle		S123	minimal	maximal	S5	S128	minimal	maximal	S4
Parameter_t_i [h]		$mg \cdot kg^{-1}N$	$mg \cdot kg^{-1}$ N	$mg \cdot kg^{-1}$ N	$mg \cdot kg^{-1}$ N	$mg \cdot kg^{-1}N$	$mg \cdot kg^{-1}$ N	$mg \cdot kg^{-1}$ N	$mg \cdot kg^{-1}$ N
N_{2_Deni}	24	0,00	0,00	0,00	0,0003	0,00	0,00	0,00	0,0037
N_{2_Deni}	36	0,00	0,00	0,01	0,0126	0,00	0,00	0,00	0,0046
N_{2_Deni}	48	0,01	0,01	0,02	0,0185	0,00	0,00	0,01	0,0047
N_{2_Deni}	60	0,01	0,01	0,04	0,0232	0,00	0,00	0,01	0,0045
N_{2_Deni}	72	0,02	0,02	0,07	0,0128	0,00	0,00	0,00	0,0002
N_2O	24	0,0000	0,00	0,00	0,0006	0,00	0,00	0,00	0,0003
N_2O	36	0,0000	0,00	0,00	0,0003	0,00	0,00	0,00	0,0005
N_2O	48	0,0000	0,00	0,00	0,0014	0,00	0,00	0,00	0,0005
N_2O	60	0,0031	0,00	0,01	0,0006	0,00	0,00	0,00	0
N_2O	72	0,0067	0,01	0,02	0,0022	0,00	0,00	0,00	0,0146
NO_2^-	24	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00	0,00	0,0412
NO_2^-	36	0,01	0,02	0,05	0	0,00	0,00	0,00	0,0731
NO_2^-	48	0,02	0,03	0,08	0	0,00	0,00	0,00	0,004
NO_2^-	60	0,04	0,05	0,13	0	0,00	0,00	0,00	0,0195
NO_2^-	72	0,02	0,03	0,07	0	0,00	0,00	0,01	0,0464
D	24	0,00	0,00	0,00	0,0009	0,00	0,00	0,01	0,0781
D	36	0,02	0,02	0,06	0,0129	0,00	0,00	0,00	0,0037
D	48	0,03	0,04	0,11	0,0199	0,00	0,00	0,00	0,0046
D	60	0,05	0,07	0,18	0,0239	0,00	0,00	0,01	0,0047
D	72	0,05	0,06	0,16	0,0151	0,00	0,00	0,01	0,0045

[1)] n_{ges} = 0,16 [2)] n_{ges} = 0,16 [3)] n_{ges} = 0,5, [4)] Datensatz für Vergleich

Tabelle A3- 12: Korrelationskoeffizienten[+] nach Spearman (r_s) für in situ und Batchversuche

	D_{insitu}	$\beta(N_{2\_Deni/insitu})$	$\beta(N_2O_{insitu})$	$\beta(NO^-_{2insitu})$
$\beta(N_{2\_Deni/insitu})$	,98**[24]	--	,26 [24]	,77** [18]
$\beta(N_2O_{insitu})$	,29 [24]	,26 [24]	--	,12 [18]
$\beta(NO_2^-{}_{insitu})$	,81** [18]	,77** [18]	,12 [18]	--
D_{Labor}	,70** [24]	,78** [24]	,08 [24]	,59** [18]
$\beta(N_{2\_Deni/Labor})$	,41*[24]	,36 [24]	-,37 [24]	,77** [18]
$\beta(N_2O_{Labor})$	,74** [24]	,68** [24]	,53** [24]	,63** [18]
$\beta(NO_2^-{}_{Labor})$	-,18 [16]	-,17 [16]	-,49 [16]	-,12 [16]

[24]…Anzahl der Datenpaare, *Die Korrelation ist auf dem Niveau 0,01 signifikant (zweiseitig)
**Die Korrelation ist auf dem Niveau 0,05 signifikant (zweiseitig), Korreliert werden die Daten der Tabelle A3-11 (Teil 1 und 2): Spalte 3 und Spalte 8; Teil 3: Spalte 2 mit Spalte 5 und Spalte 6 mit 9.

Tabelle A3- 13: r_s für Feldversuche und Laboruntersuchungen

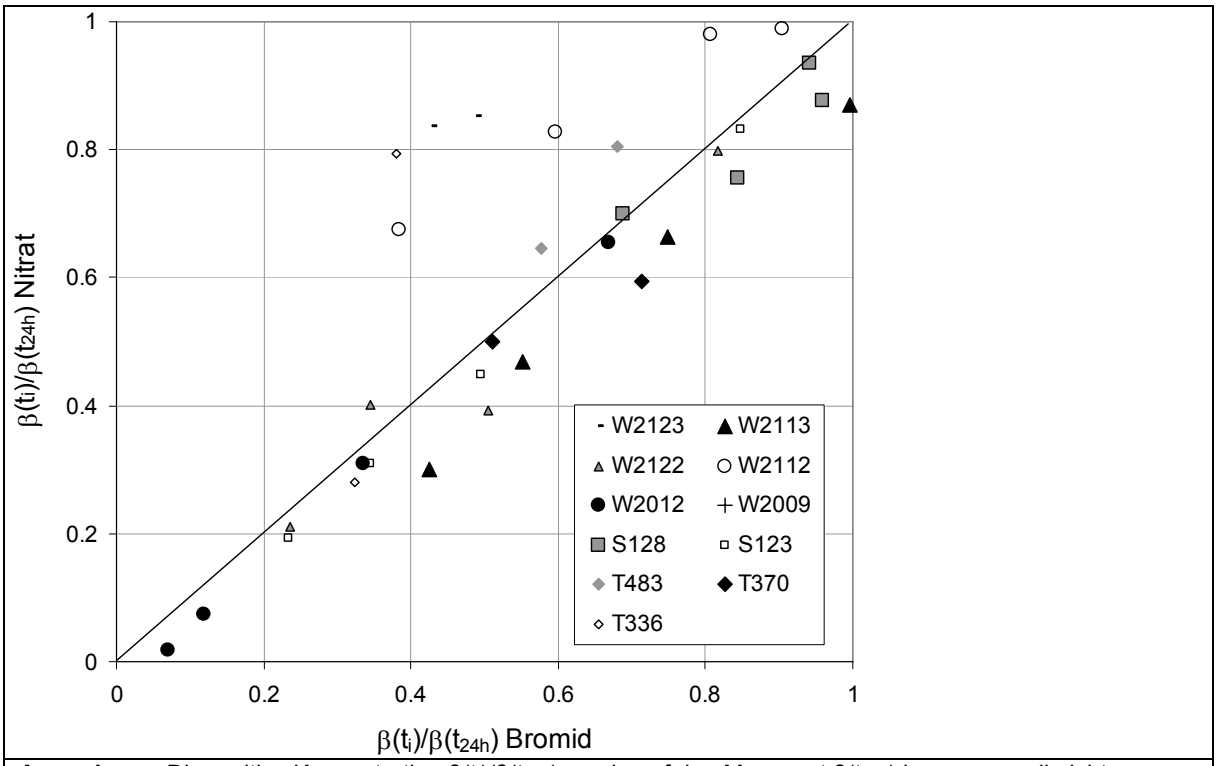
	D_{insitu}(24h)	D_{insitu}(36h)	D_{insitu}(48h)	D_{insitu}(60h)
D_{Labor}(24h)	,50 [5]	,80 [5]	,80 [5]	,80 [5]
D_{Labor}(36h)	,60 [5]	,30 [5]	,30 [5]	,30 [5]
D_{Labor}(48h)	,70 [5]	,90*[5]	,90*[5]	,90*[5]
D_{Labor}(60h)	,50 [5]	,60 [5]	,60 [5]	,60 [5]
TOC[1)]	,56 [5]	,67 [5]	,67 [5]	,67 [5]
Sulfid-S[1)]	,99**[5]	,90* [5]	90* [5]	90* [5]
D_{Labor}(365d)	,60 [5]	,70 [5]	,70 [5]	,70 [5]
$-E_{Labor}$(365d)	,60 [5]	,70 [5]	,70 [5]	,70 [5]

[5]…Anzahl der Datenpaare, *Die Korrelation ist auf dem Niveau 0,01 signifikant (zweiseitig)
**Die Korrelation ist auf dem Niveau 0,05 signifikant (zweiseitig), [1)] aus den beiden Bohrkernen einer Filterstrecke gemittelte Werte; Anlage 2, Tabellen A2-3, A2-5, A2-7, A2-8

Tabelle A3- 14: Korrelationskoeffzienten für Tracer- und Batchversuche

Versuch	W2113	W2123	W2122	S123
r_P	0,92	0,98	0,90	0,86
n	5	5	5	5
Sign,-Niveau	0,05	0,01	0,05	--
r_s	0,80	0,80	0,90	-0,10
n	5	5	5	5
Sign,-Niveau	0,05	0,05	0,05	--

r_p… nach Pearson, r_s… nach Spearman, n … Anzahl der Datenpaare



Anmerkung: Die realtive Konzentration $\beta(t_i)/\beta(t_{24h})$ wurde auf den Messwert $\beta(t_{24h})$ bezogen, weil nicht von jedem Versuch Messwerte der Konzentration des Tracers vorlagen, Wenn $\beta_o > 0{,}1 mg \cdot l^{-1}$ NO_3^- gewesen ist, so wurde diese Hintergrundkonzentration im Grundwasser vom gemessenen Wert $\beta(t_i)$ subtrahiert,

Abbildung A3-10: Relative Konzentrationen von NO_3^- und Br^{--} bei den in situ –Versuchen

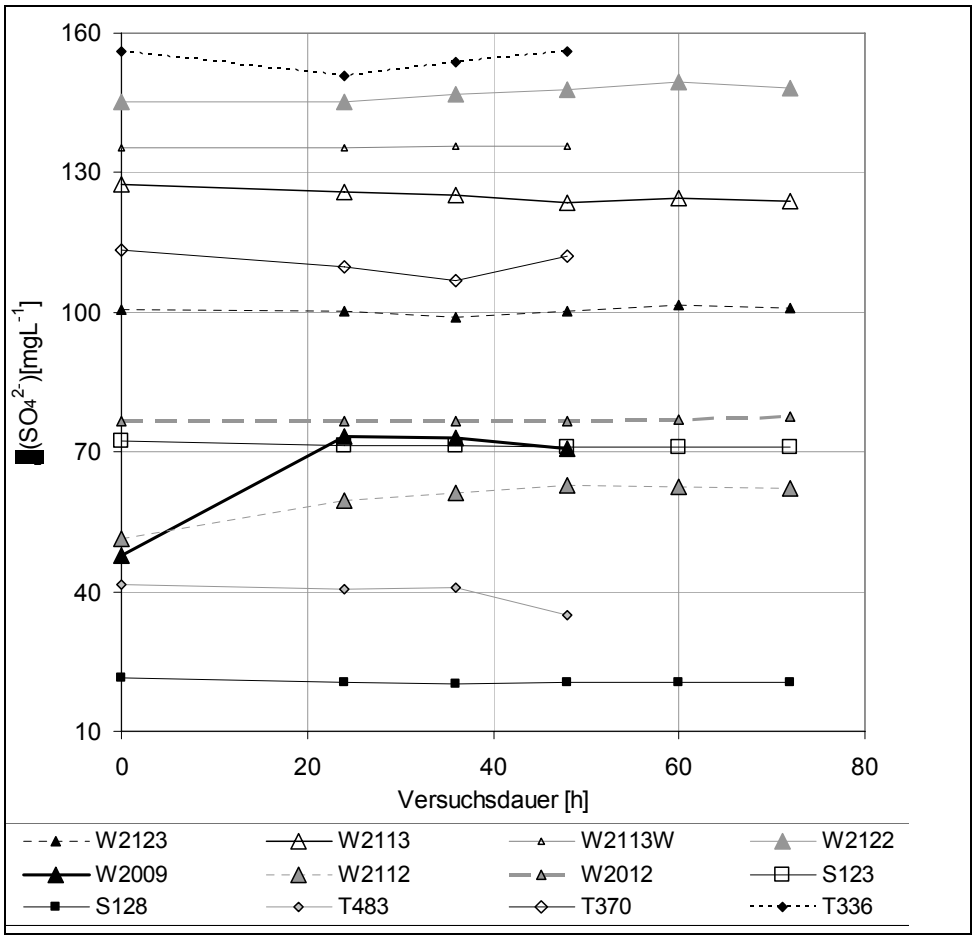


Abbildung A3-11: Gemessene Sulfatkonzentrationen bei den in situ –Versuchen

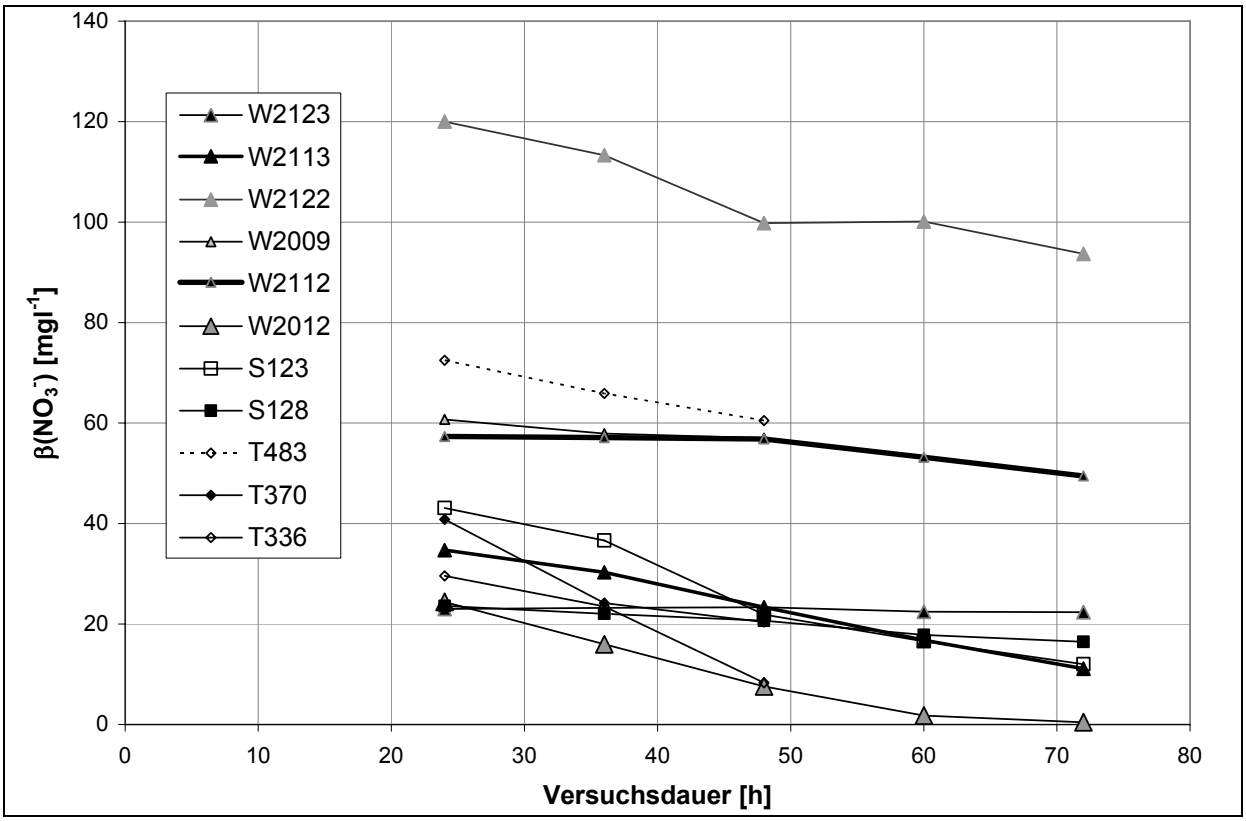


Abbildung A3-12: Gemessene Nitratkonzentrationen bei den in situ –Versuchen

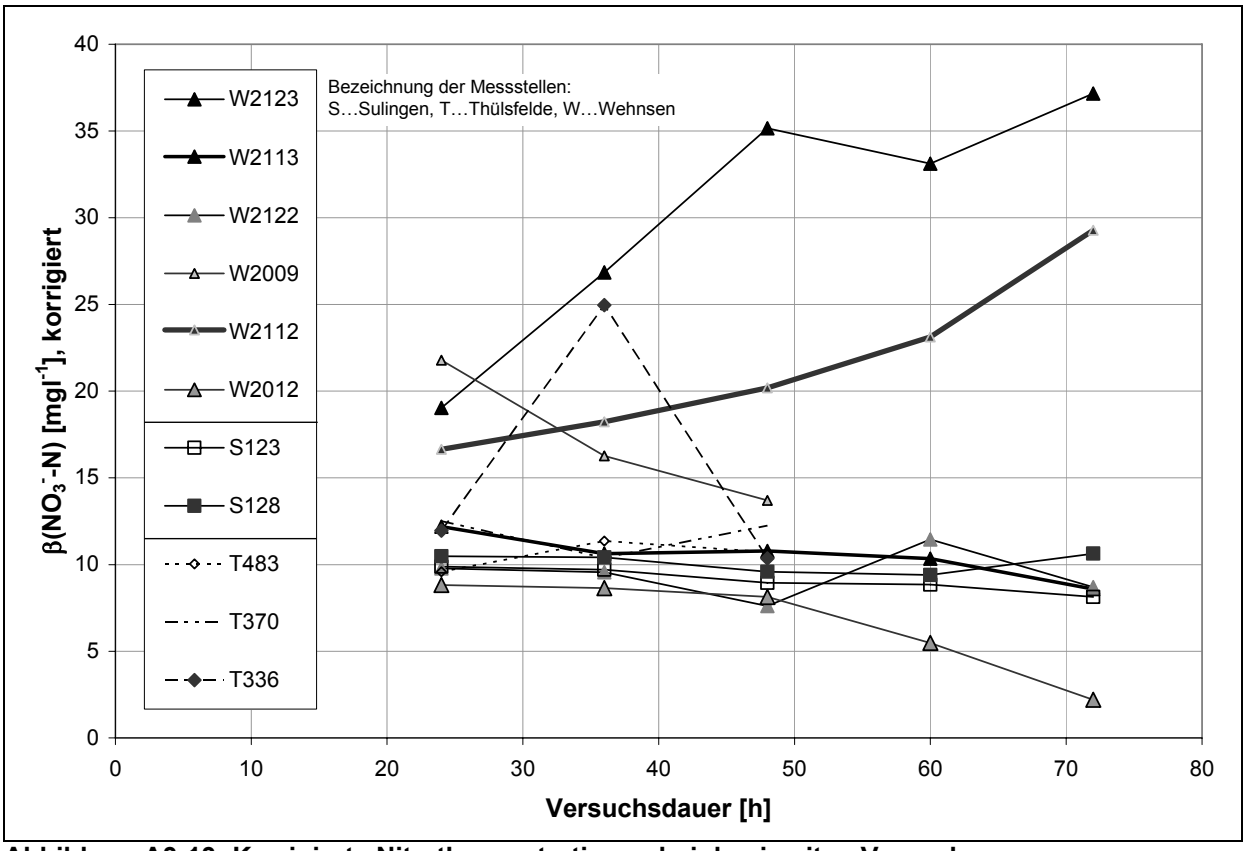


Abbildung A3-13: Korrigierte Nitratkonzentrationen bei den in situ –Versuchen

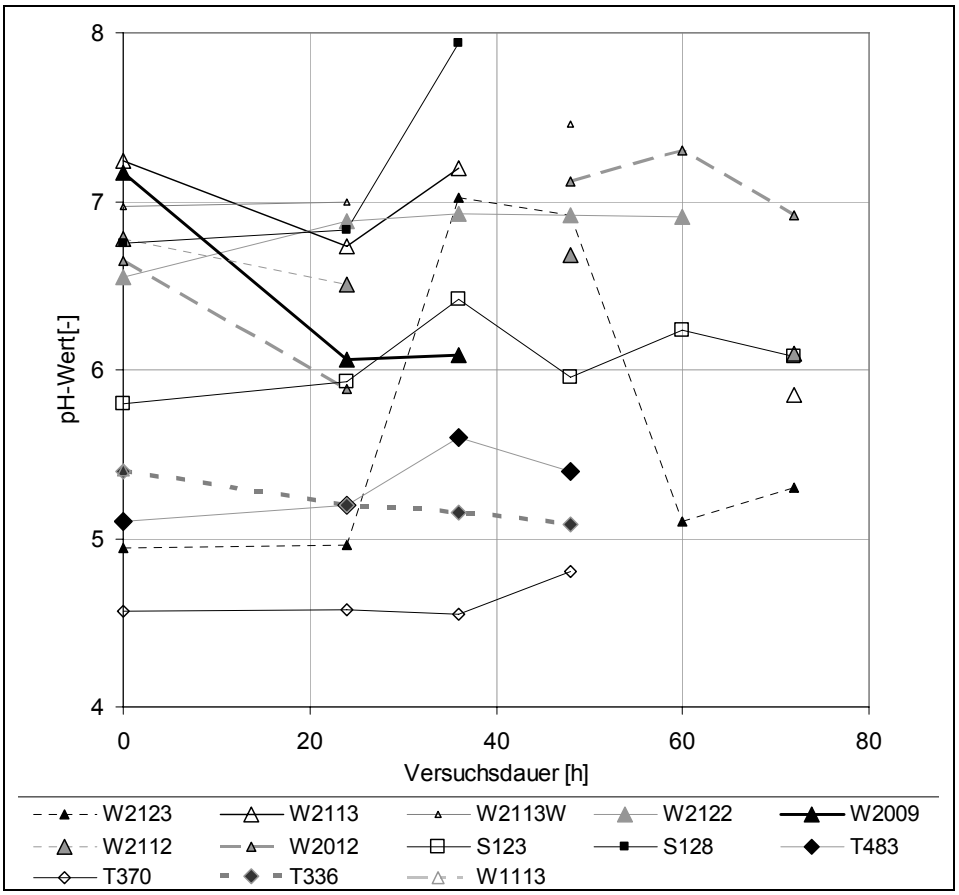


Abbildung A3-14: Zeitlicher Verlauf des pH-Wertes bei den in situ –Versuchen

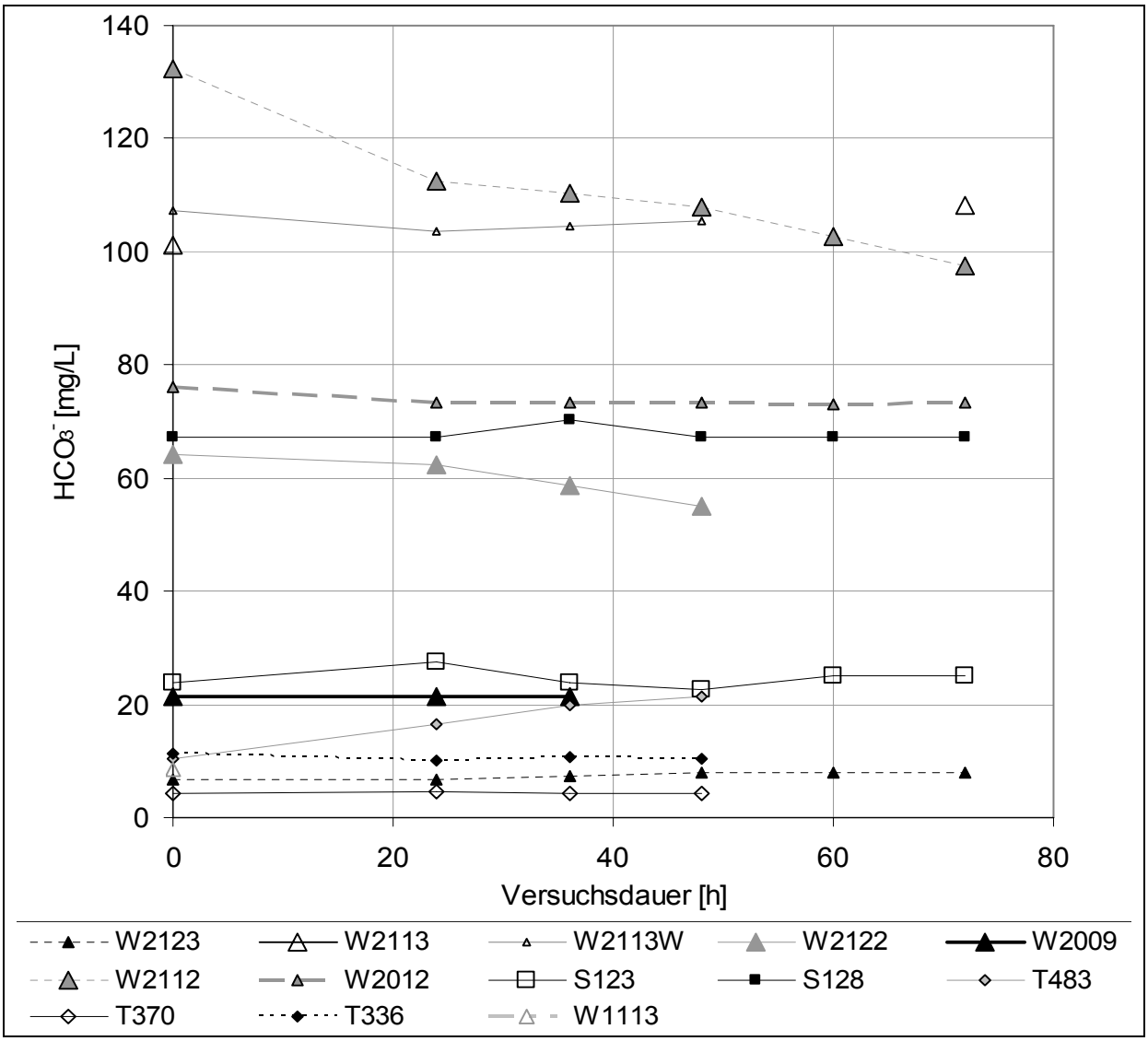


Abbildung A3-15: Zeitlicher Verlauf der HCO_3^--Konzentration bei den in situ –Versuchen

Anlage 4: Daten für den Vergleich der 3 Aquifere

Tabelle A4-1: Daten der Felduntersuchungen, die für eine Bewertung der Denitrifikation herangezogen werden

Gebiet[1)]	Messstelle	Filtertiefe[2)] [m u GWSP]	$\beta(O_2)$ [$mg \cdot l^{-1}$]	$D_{insitu}(48h)$[3)] [$\mu g \cdot l^{-1}$] N	$\beta(N_2+N_2O)$[4)] [$mg \cdot l^{-1}$] N
T	369	-4,31	8,7		0,01
T	374	-3,34	0,4		13,42
T	377	-3,84	0,9		7,57
T	483	-3,27	0,3	36,7	6,96
T	SGM1	-0,1	5,5		2,49
T	SGM3	-10	4,4		1,03
T	371	-2,89	8,8		1,81
T	248	-3,13	6,7		2,02
T	335	-5,69	2,7		5,91
T	336	-15,74	0,1	78,5	14,22
T	337	-25,75	0,1		8,42
T	353	-20,18	0,5		0,00
T	368	-13,5	0,2		23,35
T	370	-15,68	0,3	247,5	8,15
T	183	-35,38	3,8		4,01
T	372	-15,07	0,5		0,15
T	SGM6	-25	1,22		5,38
T	SGM7	-30	1,74		4,11
S	125	3,45	10,8		2,35
S	126	5,95	9,9		0,00
S	120	3,3	10,8		2,25
S	128	18,95	3,3	20,7	10,01
S	117	33,45	0,2		7,19
S	123	21,3	0,7	427	14,22
S	118	35,8	0,1		5,12
W	1009	-4,95	10,1		0,10
W	1012	-0,46	9,27		0,16
W	1020	-6			2,91
W	1028	-3,62	0,01		3,18
W	1055	-1,45	10,9		0,10
W	1066	-5,94	1,4		2,74
W	1113	-7,35	8,86		1,12
W	1114	-7,4	10,7		0,26
W	1119	-7,47	9,78		6,76
W	1120	-1,86	12,4		6,45
W	1121	-4,51	0,91		6,70
W	0018	-36,68	5,5		1,60
W	2009	-28,23	0	345,8	8,91
W	2012	-28,51	0	2206,2	11,09
W	2018	-79,81	0,49		11,70
W	2020	-86			5,80
W	2028	-31,3	1,61		6,53
W	2112	-41,44	0	1574,9	7,85
W	2113	-30	0	2441,6	1,57
W	2120	-29,37	0		8,38
W	2121	-28,41	0,66		6,93
W	2122	-31	3	814,6	
W	2123	-24	0,22	2217,9	

[1)]T: Thülsfelde, S: Sulingen, W: Wehnsen, [2)] grau hinterlegte Felder: vorwiegend oxidierendes Milieu
[3)] aus Tracerversuch; Denitrifikation 48 h nach Versuchsbeginn, [4)] aus Gasmessungen

Tabelle A4-2: Daten der Untersuchungen im Labor[4)], die für eine Bewertung der Denitrifikation herangezogen werden

Bohrung[5)]	Teufe	TOC[1)]	GV[1)]	GV[2)]	Sulfid-S	E(365d)	Bohrung	Teufe	TOC[1)]	GV[1)]	GV[2)]	Sulfid-S	E(365d)
	[m u GOK]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]N		[m u GOK]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]	[mg·kg⁻¹]N
W2123	-17,5	171	2000				W2113	-12,5	166	4000			
W2123	-18,5	520	3000				W2113	-13,5	183	3000			
W2123	-19,5	591	4000				W2113	-14,5	211	3000			
W2123	-20,5	304	4000				W2113	-15,5	202	4000			
W2123	-21,5	395	4000				W2113	-16,5	185	3000			
W2123	-22,5	253	3000				W2113	-17,5	152	3000			
W2123	-23,5	245	3000				W2113	-18,5	153	3000	4000	50	-2
W2123	-24,5	182	4000				W2113	-19,5	209	3000	3000	30	-2
W2123	-25,5	218	4000				W2113	-20,5	306	3000	3000	90	
W2123	-26,5	342	4000				W2113	-22,5	1844	15000	13000	90	
W2123	-27,5	422	4000				W2113	-23,5	242	15000	3000	200	
W2123	-28,5	393	4000				W2113	-26,5	1876	9000	8000	1450	
W2123	-29,5	368	4000				W2113	-27,5	8000	21000	46000	8490	
W2123	-30,5	289	4000				W2113	-32,5	1976	9000	7000	450	
W2123	-31,5	253	4000				W2113	-33,5	2366	10000	16000	1620	
W2123	-32,5	366	5000				W2113	-34,5	2014	15000	5000	640	-8
W2123	-33,5	801	5000				W2113	-35,5	1990	10000	34000	2130	
W2123	-34,5	717	5000				W2113	-38,5	1302	11000	24000	2980	
W2123	-35,5	711	5000	7000	3260	-109	W2113	-41,5	1093	11000	6000	2410	-27
W2123	-36,5	1055	6000	12000	1130		W2113	-42,5	1091	10000	5000	2030	-16
W2123	-37,5	1326	7000	2000	1490		W2113	-43,5	1006	10000		3200	
W2123	-38,5	1128	6000	5000	1190		W2113	-44,5	1179	11000			
W2123	-39,5	1068	6000	4000	860		W2113	-45,5	1310	18000			
W2123	-40,5	1301	6000	8000	440	-47	W2113	-46,5	1504	19000			
W2123	-41,5	1547	7000	11000	900	-105	W2113	-47,5	1650	29000			
W2123	-42,5	3954	11000	13000	1560	-104	W2113	-48,5	1171	15000			
W2123	-43,5	2862	10000	6000	890	-26	S128	-10,5	220		5000		
W2123	-44,5	2959	10000	6000	1180	-51	S128	-11	120		10000		
W2123	-45,5	2673	9000	6000	2060	-54	S128	-11,5	160		8000		
W2123	-46,5	2347	8000	3000	1340		S128	-12	140		6000		
W2123	-47,5	1690	7000	6000	1430		S128	-12,5	120		8000		
W2123	-48,5	1048	5000	3000	550		S128	-13	110		7000		
W2123	-49,5	1036	4000	3000	740	-17	S128	-15	130		9000		
W2123	-50,5	985	4000				S128	-15,5	120		8000		
W2123	-51,5	795	4000				S128	-17,5	150		9000		
W2123	-52,5	702	4000				S128	-18	120		13000	60	0
W2123	-53,5	770	4000				S128	-23	120		6000		
W2123	-54,5	510	3000				S128	-23,5	110		5000		
W2123	-55,5	554	3000				S128	-30,5	490		4000		
W2123	-56,5	781	4000				S128	-31	430		3000	470	-6
W2123	-57,5	862	3000				S123	-8,5	150		5000		
W2123	-58,5	575	3000				S123	-9	180		5000		
W2123	-59,5	497	4000				S123	-9,5	170		6000		
W2123	-60,5	806	6000				S123	-10	130		6000		
W2123	-61,5	797	6000				S123	-10,5	130		6000		
W2123	-62,5	1813	14000				S123	-12,5	130		4000		
W2122	-27,5	1864	7000	27000	2100	-114	S123	-13	180		8000		
W2122	-28,5	1149	6000	4000	830		S123	-16,5	140		10000		
W2122	-29,5	1610	5000	4000	970		S123	-17	270		10000	90	-7
W2122	-31,5	984	5000	4000	930	-16	S123	-23	240		11000		
W2122	-32,5	660	4000	22000	1330		S123	-23,5	170		11000		
W2122	-33,5	2750	8000	6000	1190	-21	S123	-30,5	440		3000		
W2122	-34,5	741	6000	9000	2040	-28	S123	-31,5	480		3000	680	-10
W2122	-35,5	888	8000	7000	1330		T-SGM[3)]	-13	130		3000		
W2122	-36,5	704	5000	11000	160		T-SGM[3)]	-17					-24[3a)]
W2122	-37,5	485	5000	14000	60		T-SGM[3)]	-18	650		4500		
W2122	-38,5	380	5000	8000	70	-1	T-SGM[3)]	-21	360		3500		0[3a)]
W2122	-39,5	413	5000	6000	100		T-SGM[3)]	-23	3100		9000		-40[3a)]
W2122	-40,5	372	4000				T-SGM[3)]	-25	650		2600	520	-41[3a)]
W2122	-41,5	787	4000	11000	70		T-SGM[3)]	-26			3400	60	-73[3a)]
W2122	-42,5	415	6000	6000	290		T-SGM[3)]	-27			9300		-70[3a)]
W2122	-43,5	515	5000	3000	100		T-SGM[3)]	-29	540		3000	2150	0[3a)]
W2122	-44,5	765	5000		50	-2	T-SGM[3)]	-33	2600		10000		-30[3a)]
W2122	-45,5	397	5000	7000			T-SGM[3)]	-35	3480			2217	-78[3a)]

[1)]an Probe aus Spülbohrung,[2)]an Probe aus Kernbohrung,[3)]Werte aus PÄTSCH (2006), [3a)]Werte wurden aus den Werten E(t) der Batchversuche von PÄTSCH (2006) linear extrapoliert: E(365) = E(t)·(365d)/t, [4)]$K \geq 10^{-6} m \cdot s^{-1}$, grau hinterlegte Felder: vorwiegend oxidierendes Milieu, [5)]T: Thülsfelde, S: Sulingen, W: Wehnsen

Tabelle A4-2: Daten der Untersuchungen im Labor[4)] - Fortsetzung -

Bezeichnung[1)]	Probenteufe	E(84d)	λ_o	λ_1
	[m u GOK]	[mg·kg^{-1}]N	[mg·kg^{-1}·d^{-1}]N	[a^{-1}]
W2113	-18,5	-2	0,002	0,04
W2113	-19,5	-2	0,002	0,03
W2123	-35,5	-21	0,2	16,8
W2123	-40,5	-9	0,14	5,8
W2123	-41,5	-13	0,16	14,6
W2123	-42,5	-10	0,16	15
W2123	-43,5	-7	0,07	2,9
W2123	-44,5	-5	0,1	7,3
W2123	-45,5	-9	0,1	8
W2123	-49,5	-3	0,04	1,5
W2122	-27,5	-22	0,2	16,8
W2122	-31,5	-2	0,05	1,83
W2122	-33,5	-4	0,06	1,8
W2122	-34,5	-6	0,07	5,1
W2122	-38,5	-1	0,003	0,04
W2122	-44,5	-1	0,005	0,07
W2113	-34,5	-15	0,037	0,73
W2113	-41,5	-12	0,086	5,8
W2113	-42,5	-6	0,043	1,1
S123	-17	0	0,011	0,18
S128	-18	-2	0	0
S128	-31	-4	0,014	0,29
S123	-31,5	-4	0,023	0,51
T-SGM[3)]	-17	-5,54	0,0659	
T-SGM[3)]	-21	0	0	0
T-SGM[3)]	-23	-9,1	0,1085	1,2
T-SGM[3)]	-25	-9,4	0,1124	8,14
T-SGM[3)]	-26	-16,8	0,2	13,9
T-SGM[3)]	-27	-16	0,19	2,88
T-SGM[3)]	-29	0	0	0

[1)]T: Thülsfelde, S: Sulingen, W: Wehnsen,[3)]Werte aus PÄTSCH (2006), λ-Werte basierend auf PÄTSCH (2006),
[4)]K≥10^{-6}m·s^{-1},grau hinterlegte Felder: vorwiegend oxidierendes Milieu,

Tabelle A4-3: Kenngrößen der statistischen Verteilung der Messwerte und Ergebnisse des Kolmogorov-Smirnov-Testes[5)]

Parameter	Basis Aquifer[4)]	TOC[1)]	Glüh[1)]	Glüh[2)]	Sulfid-S[2)]	Gas[3)]	Gas[3)]	Gas[3)]
Gebiet	**W**	**W**	**W**	**W**	**W**	**W**	**S**	**T**
Datenanzahl	33	90	90	45	46	21	7	18
Minimum	34	151,65	2000	2000	30	0,1	0,0	0,0
Maximum	121	8000	29000	46000	8490	11,7	14,2	23,3
Mittelwert	60,0	1035,9	6710	9360	1228	4,8	5,9	6,1
Standardabweichung	25,7	1062,7	4620	8790	1404	3,7	5,0	6,0
[(a)]Prüfgröße $\phi(x,MW,s)$	0,228	0,203	0,239	0,25	0,197	0,148	0,189	0,181
[(a)]Prüfgröße $\phi(\log(x),MW,s)$	0,149	0,066	0,17	0,126	0,19	0,231	0,459	0,219
[(b)]Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = 0,10)	0,208	0,127	0,127	0,179	0,177	0,259	0,436	0,279
[(c)]Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = ,05)	0,231	0,141	0,141	0,198	0,196	0,288	0,483	0,309
[(d)]Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = ,01)	0,277	0,169	0,169	0,238	0,236	0,345	0,576	0,371
Ergebnis[5)]	normal-verteilt	lognorm,-verteilt	lognorm,-verteilt	lognorm,-verteilt	normal-verteilt	normal-verteilt	normal-verteilt	normal-verteilt

[1)] aus Spühlbohrung in [$mg \cdot kg^{-1}$],[2)]aus Kernbohrung in [$mg \cdot kg^{-1}$], [3)]$N_2O+N_{2\text{-exc}}$ in [$mg \cdot l^{-1}$]N aus Feldmessungen,
[4)] in [m u GOK], [5)]für wassergesättigte, hydraulisch aktive Bereiche: $K \geq 10^{-6} m \cdot s^{-1}$,
W: Wehnsen, S: Sulingen, T: Thülsfelde
[5)] abgesicherte Normalverteilung/Lognormalverteilung, das heißt: $\phi(x,MW,s) < \chi_{n,\alpha}$ bzw, $\phi(\log(x),MW,s) < \chi_{n,\alpha}$
[(a)]Prüfgröße für den Kolomgorov-Smirnov-Test, siehe beispielsweise STORM (1974)
[(b)]bis [(d)] kritische Werte in Abhängigkeit von Datenanzahl und Irrtumswahrscheinlichkeit α, tabelliert (STORM (1974))

Tabelle A4-4: Kolmogorov-Smirnov-Test, reduzierendes Milieu Wehnsen[6)]

Parameter	TOC[1)]	Glüh[1)]	Glüh[2)]	Sulfid-S[2)]	E(365d)[3]	λ_o[4)]	λ_1[5)]
Datenanzahl	63	63	40	41	17	17	17
Minimum	372	3000	2000	50	1,0	0,0	0,0
Maximum	8000	29000	46000	8490	114,0	0,2	16,8
Mittelwert	1334	7700	9880	1367	43,9	0,1	6,2
Standardabweichung	1130	4820	9090	1427	39,7	0,1	6,0
[(a)]Prüfgröße $\phi(x,MW,s)$	0,202	0,209	0,257	0,186	0,244	0,153	0,178
[(a)]Prüfgröße $\phi(\log(x),MW,s)$	0,078	0,154	0,139	0,192	0,195	0,222	0,170
[(b)]Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = 0,10)	0,151	0,151	0,189	0,187	0,286	0,286	0,286
[(c)]Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = ,05)	0,168	0,168	0,210	0,208	0,318	0,318	0,318
[(d)]Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = ,01)	0,202	0,202	0,252	0,249	0,381	0,381	0,381
Ergebnis[5)]	log-norm,vert,	lognorm,-verteilt	lognorm,-verteilt	lognormal-verteilt	normal-verteilt	normal-verteilt	normal-verteilt

[1)] aus Spühlbohrung in [$mg \cdot kg^{-1}$],[2)]aus Kernbohrung in [$mg \cdot kg^{-1}$], [3)]Elimination in [$mg \cdot kg^{-1}$]N (Batchversuch),
[4)] in [[$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$]N, [5)] [$a^{-1}$], [6)]für wassergesättigte, hydraulisch aktive Bereiche: $K \geq 10^{-6} m \cdot s^{-1}$
[5)] abgesicherte Normalverteilung/Lognormalverteilung, das heißt: $\phi(x,MW,s) < \chi_{n,\alpha}$ bzw, $\phi(\log(x),MW,s) < \chi_{n,\alpha}$
[(a)]Prüfgröße für den Kolomgorov-Smirnov-Test, siehe beispielsweise STORM (1974)
[(b)]bis [(d)] kritische Werte in Abhängigkeit von Datenanzahl und Irrtumswahrscheinlichkeit α, tabelliert (STORM (1974))

Anlage 5: Regionalisierung und Modellierung

Tabelle A5-1: Prüfung der gemessenen und generierten Werte für λ_1 auf Normalverteilung[1)]

	W2123		W2122		W2113		Gesamt	
	λ_1	LOG(λ_1)	λ_1	LOG(λ_1)	λ_1	LOG(λ_1)	λ_1	LOG(λ_1)
Anzahl der Werte	32	32	27	27	8	8	73	73
Minimum	0,004	-2,438	0,004	-2,438	0,730	-0,137	0,004	-2,438
Maximum	16,75	1,224	21,130	1,325	31,65	1,500	31,65	1,500
Mittelwert	3,795	-0,866	4,918	-0,399	17,4	0,959	5,576	-0,447
Standardabweichung (s)	5,490	1,586	6,903	1,353	12,8	0,687	8,04	1,49
(a) Prüfgröße ϕ(x,MW,s)	**0,326**	**0,294**	**0,293**	**0,207**	**0,259**	**0,328**	**0,244**	**0,197**
(b) Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = 0,10)	0,208	0,208	0,225	0,225	0,41	0,41	0,14	0,14
(c) Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = ,05)	0,231	0,231	0,25	0,25	0,454	0,454	0,157	0,157
(d) Kritischer Wert $\chi_{n,\alpha}$ (α = ,01)	0,277	0,277	0,3	0,3	0,542	0,542	0,188	0,188

W2122 … Bezeichnung der Bohrung
Gesamt … sämtliche Daten der Bohrungen und 3 Tracerversuche wurden einbezogen
LOG … logarithmierte Werte (dekadischer Logarithmus) wurden verwendet
$\lambda_1[a^{-1}]$ … Umsatzkennwert für eine Reaktion 1. Ordnung
[1)] grau hinterlegt: abgesicherte Normalverteilung, das heißt: **ϕ(x,MW,s) <** $\chi_{n,\alpha}$
(a) Prüfgröße für den Kolomgorov-Smirnov-Test, siehe beispielsweise STORM (1974)
(b) bis (d) kritische Werte in Abhängigkeit von Datenanzahl und Irrtumswahrscheinlichkeit α, tabelliert beispielsweise in STORM (1974)

Tabelle A5-2: Intervallgrenzen, Mittelwerte und Häufigkeit von K-Werten[1)]

Intervallgrenzen [m·s^1]	Mittelwert [m·s^1]	s [m·s^1]	Häufigkeit [%]	Sediment[2)]
Klasse 1: $10^{-1} \geq K > 10^{-3}$	$3{,}4 \cdot 10^{-3}$	$\pm 3{,}6 \cdot 10^{-3}$	14	Grobsand
Klasse 2: $10^{-3} \geq K > 10^{-4}$	$2{,}8 \cdot 10^{-4}$	$\pm 2{,}5 \cdot 10^{-4}$	37	Mittelsand
Klasse 3: $10^{-4} \geq K > 10^{-5}$	$6{,}0 \cdot 10^{-5}$	$\pm 2{,}6 \cdot 10^{-5}$	40	Feinsand
Klasse 4: $10^{-5} \geq K > 10^{-9}$	$2{,}9 \cdot 10^{-6}$	---------	9	schluffiger Sand

[1)]Auf der Basis von Tabelle A2-4, Anlage 2, Blatt 2-8 und 2-9, [2)]Sedimentbezeichnung für die K-Werte nach HÖLTING (1996)

Tabelle A5-2a: Angenommene[1)] Werte für n_e

Klasse[2)]	Sediment	n_e [-]
Klasse 1	Grobsand	0,25
Klasse 2	Mittelsand	0,20
Klasse 3	Feinsand	0,18
Klasse 4	schluffiger Sand	0,15

[1)]auf Basis des Sedimentes angenommene Werte nach HÖLTING (1996), die in das Modell eingehen, [2)]für die Klassen nach Tabelle A5-2

.

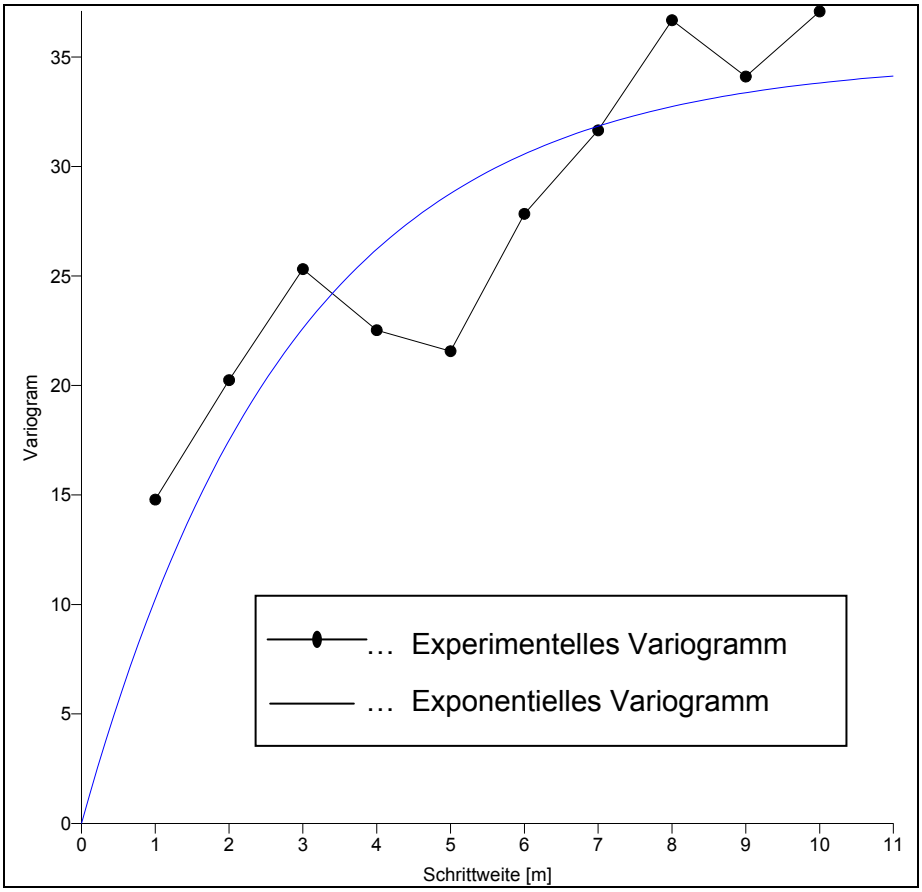


Abbildung A5-1: Experimentelles und Exponentielles Variogramm für λ_1, Bohrung 2123

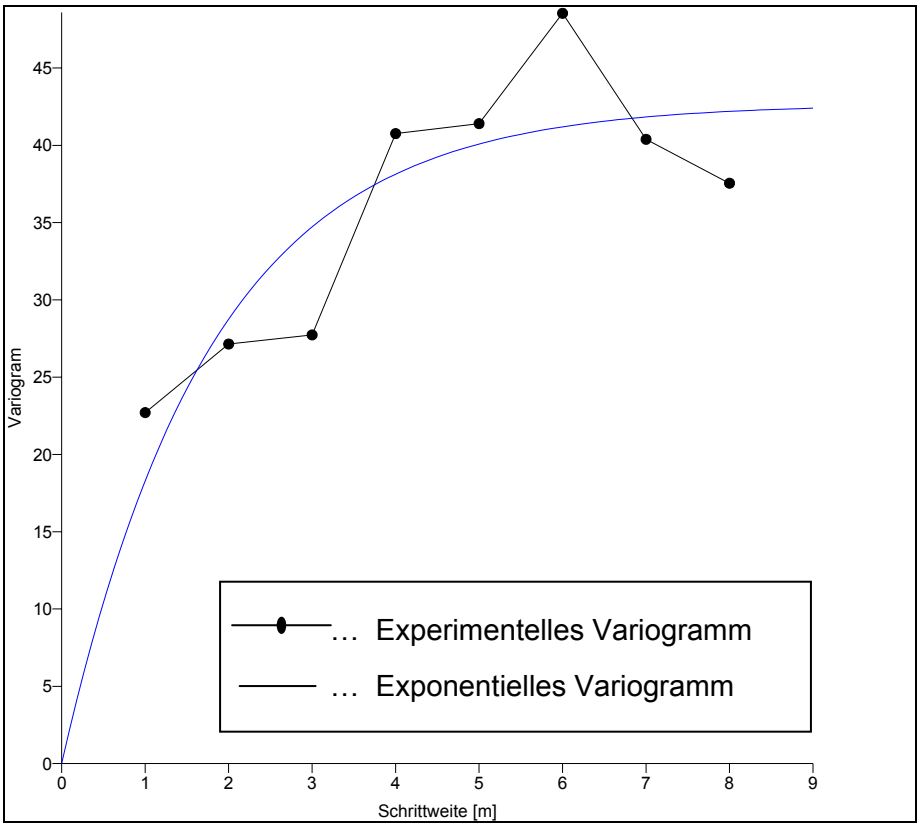


Abbildung A5-2: Experimentelles und Exponentielles Variogramm für λ_1, Bohrung 2122

Tabelle A5-3: Gemessene und generierte Werte von λ_1

Bohrung	Bezeichnung der Probe	Teufe [m u GOK]	λ_1 [1)] [a^{-1}]	Bohrung	Bezeichnung der Probe	Teufe [m u GOK]	λ_1 [1)] [a^{-1}]
W2123		-19,5	*0,00365*	W2122		-32,5	***0,00365***
W2123		-20,5	*0,00365*	W2122	W1	-33,5	**1,971**
W2123		-21,5	*0,00365*	W2122	W2	-34,5	**5,11**
W2123		-24,5	*0,00365*	W2122		-35,5	***15,8702***
W2123		-25,5	*0,00365*	W2122		-36,5	***0,09125***
W2123		-26,5	*0,00365*	W2122		-37,5	***0,09125***
W2123		-27,5	*0,00365*	W2122	W11	-38,5	**0,0365**
W2123		-28,5	*0,00365*	W2122		-39,5	***0,09125***
W2123		-29,5	*0,00365*	W2122		-40,5	***0,00365***
W2123		-30,5	*0,00365*	W2122		-41,5	***0,00365***
W2123		-31,5	*0,00365*	W2122		-42,5	***5,3509***
W2123		-32,5	*0,09125*	W2122		-43,5	***0,1***
W2123		-33,5	*0,09125*	W2122	W12	-44,5	**0,073**
W2123		-34,5	*0,09125*	W2122		-45,5	***0,09125***
W2123	W13	-35,5	16,7535	W2122		-46,5	*0,00365*
W2123		-36,5	*5,3509*	W2122		-47,5	*0,09125*
W2123		-37,5	*10,61055*	W2122		-49,5	*5,3509*
W2123		-38,5	*5,3509*	W2122		-50,5	*15,8702*
W2123		-39,5	*5,3509*	W2122		-51,5	*15,8702*
W2123	W15	-41,5	14,527	W2122		-52,5	*15,8702*
W2123	W3	-42,5	14,9285	W2122		-53,5	*21,13*
W2123	W4	-43,5	2,7375				
W2123	W16	-44,5	7,446				
W2123	W17	-45,5	8,03				
W2123		-46,5	*15,8702*	W2113	W21	-32,5	21,13
W2123		-47,5	*10,61055*	W2113		-33,5	*26,39*
W2123		-48,5	*0,09125*	W2113	W23	-34,5	0,73
W2123	W18	-49,5	1,5695	W2113		-35,5	*26,39*
W2123		-50,5	*0,00365*	W2113		-38,5	*31,65*
W2123		-51,5	*0,00365*	W2113	W7	-41,5	5,767
W2123		-52,5	*0,00365*	W2113	W8	-42,5	0,913
W2123		-53,5	*0,00365*	W2113		-43,5	*26,39*
W2122		-26,5	***0,00365***	Tracer	W2009	**-46,5**	**0,62**
W2122	W9	-27,5	**16,6805**	Tracer	W2009	**-47,5**	**0,62**
W2122		-28,5	***5,3509***	Tracer	W2112	-58,5	6,62
W2122		-29,5	***0,1***	Tracer	W2112	-59,5	6,62
W2122		-30,5	***0,00365***	Tracer	W2012	-40,5	5,62
W2122	W10	-31,5	**1,7885**	Tracer	W2012	-41,5	5,62

[1)] Die aus dem Glühverlust generierte λ_1 –Werte sind kursiv gedruckt.
Fettgedruckte Werte gehen in direkt in den zu modellierenden Aquiferabschnitt ein

.

Tabelle A5-4: Intervallgrenzen, Mittelwerte und Häufigkeit der λ_1'- Werte

Intervallgrenzen [a^{-1}]	Mittelwert[1)] MW [a^{-1}]	s [a^{-1}]	n	p*(k) [2)]
Klasse 1: $0 \leq \lambda_1 < 0{,}1$	0,016	± 0,024	56	0,77
Klasse 2: $0{,}1 \leq \lambda_1 < 0{,}2$	0,15	± 0,022	11	0,15
Klasse 3: $0{,}2 \leq \lambda_1 < 0{,}3$	0,24	± 0,029	5	0,07
Klasse 4: $0{,}3 \leq \lambda_1 < 0{,}3$	0,32	--	1	0,01

[1)] Mittelwert der Werte einer Klasse, [2)]p(k)*…Häufigkeit der jeweiligen Klasse

Tabelle A5-5: Variation der Dispersion (α_x und α_z) – homogener Aquifer

Szenario	Beobachtungs-brunnen	δy_i	y_i	δa_k	a_k	$SK_{i,k}$
7	1	+ 1,3	3,3	+90	10	+0,048
7	2	- 1,5	7,2	+90	10	- 0,023
7	3	- 5,9	12,3	+90	10	- 0,053
7	4	- 7,9	14,5	+90	10	- 0,061
6	1	+ 0,2	3,3	- 5	10	- 0,121
6	2	+ 1,1	7,2	- 5	10	- 0,306
6	3	+ 3,3	12,3	- 5	10	- 0,537
6	4	+ 5,2	14,5	- 5	10	- 0,717

Tabelle A5-6: Variation des Nitrateintrages (β_{in}) – homogener Aquifer

Szenario	Beobachtungs-brunnen	δy_i	y_i	δa_k	a_k	$SK_{i,k}$
9	1	+1,0	3,3	-50	200	-1,212
9	2	+1,8	7,2	-50	200	-1,000
9	3	+2,6	12,3	-50	200	-0,842
9	4	+2,8	14,5	-50	200	-0,77
8	1	+3,5	3,3	-100	200	-2,151
8	2	+6,5	7,2	-100	200	-1,795
8	3	+8,5	12,3	-100	200	-1,380
8	4	+8,5	14,5	-100	200	-1,173

Tabelle A5-7: Variation der hydraulischen Leitfähigkeit K – homogener Aquifer

Szenario	Beobachtungs-brunnen	δy_i	y_i	δa_k	a_k	$SK_{i,k}$
3	1	0	3,3	0,0054	0,0006	0
3	2	0,1	7,2	0,0054	0,0006	0,001
3	3	0,1	12,3	0,0054	0,0006	0,001
3	4	0,2	14,5	0,0054	0,0006	0,001
2	1	0	3,3	-0,00054	0,0006	0
2	2	0	7,2	-0,00054	0,0006	0
2	3	0	12,3	-0,00054	0,0006	0
2	4	0	14,5	-0,00054	0,0006	0

Tabelle A5-8: Variation des Porenvolumens (n_e und n_{ges}) – homogener Aquifer

Szenario	Beobachtungs-brunnen	δy_i	y_i	δa_k	a_k	$SK_{i,k}$
4	1	-0,77	3,3	-0,05	0,2	0,9
4	2	-1,58	7,2	-0,05	0,2	0,9
4	3	-2,78	12,3	-0,05	0,2	0,9
4	4	-3,22	14,5	-0,05	0,2	0,9
5	1	0,88	3,3	0,05	0,2	1,1
5	2	2,00	7,2	0,05	0,2	1,1
5	3	3,44	12,3	0,05	0,2	1,1
5	4	4,06	14,5	0,05	0,2	1,2

..

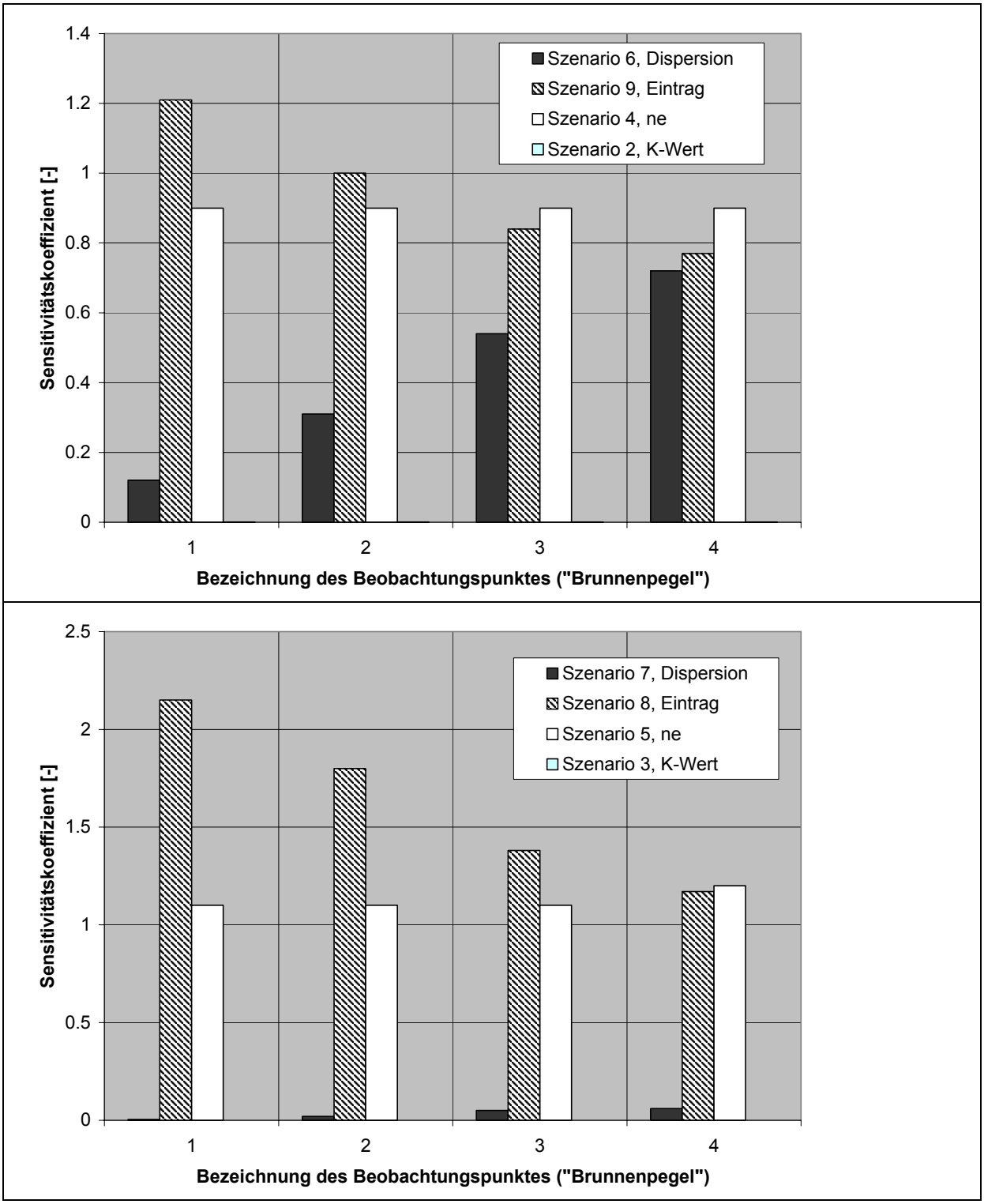


Abbildung A5-3: Sensitivitätskoeffizienten für die Szenarien 2 bis 9

Prüfung numerischer Stabilitätskriterien

Ausführliche Darstellungen folgender Kriterien finden sich beispielsweise in SPITZ & MORENO (1996).

(1) Peclet-Kriterium:

Die Peclet-Zahl Pe gibt das Verhältnis zwischen dispersivem und advektivem Massenfluss in einer Rechenzelle an und wird wie folgt definiert:

$$Pe_x = \frac{v_{ax} \cdot \Delta x}{D_x} \qquad (A8-1)$$

v_{ax} … Abstandsgeschwindigkeit (in Richtung x)

Δx … Diskretisierung (Zellweite in Richtung x)

D_x … Koeffizient der (longitudinalen) Dispersion in Richtung x ($=\alpha_{xx} \cdot v_a$)

Das Peclet-Kriterium, um numerische Dispersion zu minimieren, wird mit einer möglichst kleinen Peclet-Zahl erreicht, im Idealfall <1. Betrachtet man als einen groben Überschlag nur die horizontalen Transportprozesse (eindimensionale Betrachtung), so kann in der Gleichung der Peclet-Zahl die Abstandsgeschwindigkeit in Zähler und Nenner gekürzt werden, es resultiert folgende vereinfachte Form der Gleichung:

$$Pe = \frac{\Delta x}{\alpha_x} \qquad (A8-1a)$$

Mit den entsprechenden Parametern aus Tabelle 8-2 ergibt sich eine Peclet-Zahl von Pe = 1, so dass die hier gewählte Diskretisierung ausreichend klein gewählt worden ist. .

(2) Courant-Kriterium:

Neben der räumlichen Diskretisierung muss das Transportmodell auch zeitlich diskretisiert werden, d.h. der Zeitschritt Δt muss festgelegt werden. Für diesen ist das Courant-Kriterium (Co) maßgebend, welches wie folgt festgelegt wird:

$$Co_i = \left| \frac{\Delta t \cdot vi}{\Delta i} \right| \leq 1 \qquad \text{mit: } i = x, z \qquad (A8-2)$$

Es muss demzufolge ein entsprechend kleiner Zeitschritt gewählt werden. Die verwendete Software MT3D passt den Zeitschritt automatisch an die jeweils berechnete Abstandsgeschwindigkeit v_a an, so dass das Courant-Kriterium eingehalten wird.

(3) Neumann-Kriterium:

$$\frac{D_x}{\Delta x^2} \Delta t = \frac{D_z}{\Delta z^2} \Delta t \leq 0{,}5 \qquad (A8-3)$$

D_x … Koeffizient der (longitudinalen) Dispersion in Richtung x ($=\alpha_x \cdot v_a$),

D_z … Koeffizient der (transversalen) Dispersion in Richtung z ($=\alpha_z \cdot v_a$),

Auch das Neumann-Kriterium wird durch automatische Festlegung des Zeitschrittes Δt in Abhängigkeit der Abstandsgeschwindigkeit v_a von der Software festgelegt.

(4) Höhen-Längen-Verhältnis der Zellen (Cell-Aspect-Ratio)

In Abhängigkeit der hydraulischen Leitfähigkeiten in x- und z-Richtung sollte bei der Diskretisierung folgendes Verhältnis eingehalten werden:

$$\frac{\Delta z}{\Delta x} K_x = \frac{\Delta x}{\Delta z} K_z \qquad (A8-4)$$

Im vorliegenden Fall wird dieses Verhältnis nicht eingehalten: $2 \cdot 10^{-5} < 6 \cdot 10^{-3}$. Da alle Zellen die gleiche Ausdehnung haben, sind numerische Fehler bei den Rechenläufen nicht aufgetreten.

<u>Das Kriging-Gleichungssystem</u>

Der Aufbau eines Kriging-Gleichungssystems ist beispielsweise in AKIN & SIEMES (1988) oder SCHAFMEISTER (1999) beschrieben. An dieser Stelle werden daraus einige Schwerpunkte dazu aufgezeigt:

Der Wert i* wird für einen Punkt x aus einer Linearkombination der gewichteten Probenwerte i aus n Messpunkten x_i dar. Die Gewichte sind dabei ℓ_α.

$$i^*(x) = \sum_{i=1}^{n} \ell_\alpha \cdot i(x_i) \qquad (8-5)$$

i* … gewichteter Indikatorwert

Folgende Bedingungen müssen erfüllt sein:

(1) i* ist erwartungstreu, der Erwartungswert EX[i* - i] = 0 und

(2) der mittlere quadratische Fehler sei ein Minimum

Die Summe der Gewichte ℓ_α ist 1. Um die Fehlervarianz zu minimieren wird ein Lagrange-Multiplikator μ eingeführt. Das Minimum erhält man durch Null-Setzen der partiellen Ableitungen. Dies führt zu dem linearen Kriginggleichungssystem mit n+1 Gleichungen.

Das Kriginggleichungssystem kann wie folgt niedergeschrieben werden:

$$\ell_{\alpha 1} \cdot \gamma(x_1 - x_1) + \ell_{\alpha 2} \cdot \gamma(x_1 - x_2) + \ldots + \ell_{\alpha n} \cdot \gamma(x_1 - x_n) + \mu = \gamma(x_1 - x_0)$$

$$\ell_{\alpha 1} \cdot \gamma(x_2 - x_1) + \ell_{\alpha 2} \cdot \gamma(x_2 - x_2) + \ldots + \ell_{\alpha n} \cdot \gamma(x_2 - x_n) + \mu = \gamma(x_2 - x_0)$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$\ell_{\alpha 1} \cdot \gamma(x_n - x_1) + \ell_{\alpha 2} \cdot \gamma(x_n - x_2) + \ldots + \ell_{\alpha n} \cdot \gamma(x_n - x_n) + \mu = \gamma(x_n - x_0)$$

$$\ell_{\alpha 1} + \ell_{\alpha 2} + \ldots + \ell_{\alpha 1} + 0 = 1$$

Anlage 6: Übersicht zu den Bohrungen und den dazugehörigen Feld- und Laboruntersuchungen

Tabelle A6-1: Übersicht über Untersuchungen an Spülbohrung (S) und Kernbohrung (K) 2123 in Wehnsen[1]

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	C_l	C_{HWL}	DOC_l	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
0-1	S		S	S	S	S			
1-2	S		S	S	S	S			
2-3	S	S	S						
3-4	S	S	S						
4-5	S	S	S	S	S	S			
5-6	S	S	S						
6-7	S	S	S						
7-8	S	S	S	S	S	S			
8-9	S	S	S						
9-10	S	S	S						
10-11	S	S	S	S	S	S			
11-12	S	S	S						
12-13	S	S	S						
13-14	S	S	S	S	S	S			
14-15	S	S	S						
15-16	S	S	S						
16-17	S	S	S	S	S	S			
17-18	S	S	S						
18-19	S	S	S						
19-20	S	S	S						
20-21	S	S	S	S	S	S			
21-22	S	S	S						
22-23	S	S	S						
23-24	S	S	S	S	S	S			
24-25	S	S	S						
25-26	S	S	S				S		
26-27	S	S	S	S	S	S			
27-28	S	S	S						
28-29	S	S	S						
29-30	S	S	S						
30-31	S	S	S	S	S	S			

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel, an den Spülbohrungen (S) wurde nur der Gesamtschwefelgehalt bestimmt.

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke von 2 Meter Länge.

Tabelle A6-1: Übersicht über Untersuchungen an Spülbohrung (S) und Kernbohrung (K) 2123 in Wehnsen[1] - Fortsetzung -

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	Cl	CHWL	DOCl	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
31-32	S	S	S						
32-33	S	S	S						
33-34	S	S	S	S	S	S			
34-35	S	S	S						
35-36	SK	S	S				K	W13	
36-37	SK	SK	S	S	S	S	SK		
37-38	SK	SK	S				SK		
38-39	SK	SK	S				SK		
39-40	SK	SK	S	S	S	S	SK		
40-41	SK	SK	S				SK	W14	
41-42	SK	SK	S				SK	W15	
42-43	SK	SK	S	S	S	S	K	W3, W340	W2123
43-44	SK	SK	S				K	W4, W340	W2123
44-45	SK	SK	S				K	W16	
45-46	SK	SK	S	S	S	S	K	W17	
46-47	SK	SK	S				K		
47-48	SK	SK	S				K		
48-49	SK	SK	S				K		
49-50	SK	SK	S	S	S	S	K	W18	
50-51	S	S	S						
51-52	S	S	S						
52-53	S	S	S	S	S	S			
53-54	S	S	S						
54-55	S	S	S						
55-56	S	S	S	S	S	S			
56-57	S	S	S						
57-58	S	S	S						
58-59	S		S	S	S	S			
59-60	S		S						
60-61	S		S						
61-62	S		S	S	S	S			
62-63	S		S						

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel, an den Spülbohrungen (S) wurde nur der Gesamtschwefelgehalt bestimmt.

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke von 2 Meter Länge.

Tabelle A6-2: Übersicht über Untersuchungen an Spülbohrung (S) und Kernbohrung (K) 2122 in Wehnsen[1]

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	C_l	C_{HWL}	DOC_l	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
0-1	S	S	S	S	S	S			
1-2	S	S	S	S	S	S			
2-3	S	S	S						
3-4	S	S	S						
4-5	S		S	S	S	S			
5-6	S	S	S						
6-7	S		S						
7-8	S	S	S	S	S	S			
8-9	S	S	S						
9-10	S	S	S						
10-11	S	S	S	S	S	S			
11-12	S	S	S						
12-13	S	S	S	S	S	S			
13-14	S	S	S	S	S	S			
14-15	S	S	S						
15-16	S	S	S						
16-17	S	S	S	S	S	S			
17-18	S	S	S						
18-19	S	S	S						
19-20	S	S	S	S	S	S			
20-21	S	S	S						
21-22	S	S	S				S		
22-23	S	S	S	S	S	S	S		
23-24	S	S	S						
24-25	S	S	S						
25-26	S	SK	S	S	S	S			
26-27	S	SK	S						
27-28	SK	SK	S				K	W9	
28-29	SK	SK	S	S	S	S	K		
29-30	SK	SK	S				K		
30-31	SK	SK	S	S	S	S	SK		

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel, an den Spülbohrungen (S) wurde nur der Gesamtschwefelgehalt bestimmt.

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke von 2 Meter Länge.

Tabelle A6-2: Übersicht über Untersuchungen an Spülbohrung (S) und Kernbohrung (K) 2122 in Wehnsen[1] - Fortsetzung -

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	Cl	CHWL	DOCl	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
31-32	SK	SK	S				K	W10	
32-33	SK	SK	S				SK		
33-34	SK	SK	S	S	S	S	SK	W1, W120	W2122
34-35	SK	SK	S				SK	W2, W120	W2122
35-36	SK	SK	S				SK		
36-37	SK	SK	S				K		
37-38	SK	SK	S	S	S	S	K		
38-39	SK	SK	S				K	W11	
39-40	SK	SK	S				K		
40-41	S	SK	S						
41-42	SK	SK	S	S	S	S	K		
42-43	SK	SK	S				K		
43-44	SK	S	S	S	S	S	K		
44-45	S	SK	S				K	W12	
45-46	SK	SK	S						
46-47	S	S	S	S	S	S			
47-48	S	S	S						
48-49	S	S	S						
49-50	S	S	S	S	S	S			
50-51	S	S	S						
51-52	S	S	S	S	S	S			
52-53	S	S	S						
53-54	S	S	S						
54-55	S		S	S	S	S			
55-56	S		S						
56-57	S		S		S	S			
57-58	S		S	S					
58-59	S		S						
59-60	S		S	S	S	S			
60-61	S		S						

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel, an den Spülbohrungen (S) wurde nur der Gesamtschwefelgehalt bestimmt.

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke von 2 Meter Länge.

Tabelle A6-3: Übersicht über Untersuchungen an Spülbohrung (S) und Kernbohrung (K) 2113 in Wehnsen[1]

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	C_l	C_{HWL}	DOC_l	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
0-1	S	S	S						
1-2	S	S	S	S	S	S			
2-3	S	S	S	S					
3-4	S	S	S						
4-5	S	S	S	S	S	S			
5-6	S	S	S						
6-7	S	S	S						
7-8	S	S	S	S	S	S			
8-9	S	S	S						
9-10	S	S	S						
10-11	S	S	S	S	S	S			
11-12	S	S	S						
12-13	S	S	S						
13-14	S	S	S						
14-15	S	S	S	S	S	S			
15-16	S	S	S						
16-17	S	S	S						
17-18	S	S	S	S	S	S			
18-19	SK	SK	S				K	W5	W1113[4]
19-20	SK	SK	S				K	W6	W1113[4]
20-21	SK	SK	S	S	S	S	K		
21-22	SK	SK	S				SK	W19	
22-23	SK	SK	S				K		
23-24	SK	SK	S	S	S	S	K		
24-25	SK	SK	S				K		
25-26	SK	SK	S				K	W22	
26-27	SK	SK	S	S	S	S	K		
27-28	SK	SK	S				K		
28-29	SK	K	S				SK	W20	
29-30	SK	SK	S	S	S	S	SK		
30-31	SK	SK	S				SK		

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel, an den Spülbohrungen (S) wurde nur der Gesamtschwefelgehalt bestimmt.

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke von 2 Meter Länge.

[4] Dieser Tracerversuch wurde an der in etwa 2 Meter Entfernung befindlichen Messstelle 1113 durchgeführt.

Tabelle A6-3: Übersicht über Untersuchungen an Spülbohrung (S) und Kernbohrung (K) 2113 in Wehnsen[1] - Fortsetzung -

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	Cl	CHWL	DOCl	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
31-32	SK	SK	S				SK	W21	
32-33	SK	SK	S	S	S	S	SK		
33-34	SK	SK	S				K		
34-35	SK	SK	S				K	W23	
35-36	SK	SK	S	S	S	S	K		
36-37	SK	SK	S				K		
37-38	SK	SK	S				K		
38-39	SK	SK	S	S	S	S	K		
39-40	SK	SK	S				K		
40-41	SK	SK	S				K		
41-42	SK	SK	S	S	S	S	K	W7, W780	W2113, W2113W
42-43	SK	SK	S				K	W8, W780	W2113, W2113W
43-44	S	SK	S	S	S	S	K		
44-45	S	SK	S						
45-46	S	S	S						
46-47	S	S	S	S	S	S			
47-48	S	S	S						
48-49	S	S	S	S	S	S			
49-50	S	S	S						
50-51	S	S	S	S	S	S			
51-52									

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel, an den Spülbohrungen (S) wurde nur der Gesamtschwefelgehalt bestimmt.

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke von 2 Meter Länge.

Tabelle A6-4: Übersicht über Untersuchungen an der Kernbohrung (K) 123 in Sulingen[1]

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	C_l	C_{HWL}	DOC_l	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
0-1									
1-2									
2-3									
3-4									
4-5									
5-6									
6-7									
7-8	K	K	K						
8-9	K	K	K						
9-10	K	K	K						
10-11	K	K	K						
11-12									
12-13	K	K	K						
13-14	K	K	K						
14-15									
15-16									
16-17	K	K	K				K	S(1)	
17-18	K	K	K						
18-19									
19-20									
20-21									
21-22									
22-23									
23-24	K	K	K						
24-25	K	K	K						
25-26									
26-27									
27-28									
28-29									
29-30									
30-31	K	K	K				K	S(2)	S123
31-32	K	K	K						

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke.

Tabelle A6-5: Übersicht über Untersuchungen an der Kernbohrung (K) 128 in Sulingen[1]

Teufe [m]	Glüh-verlust	K- Wert	TOC	C_l	C_{HWL}	DOC_l	S-Spezies[2]	Batch-versuch	Feld-versuch[3]
0-1									
1-2									
2-3									
3-4									
4-5									
5-6									
6-7									
7-8									
8-9									
9-10									
10-11	K	K	K						
11-12	K	K	K						
12-13	K	K	K						
13-14									
14-15									
15-16	K	K	K						
16-17									
17-18	K	K	K				K	S3	
18-19									
19-20									
20-21									
21-22									
22-23									
23-24	K	K	K						
24-25									
25-26									
26-27									
27-28									
28-29									
29-30									
30-31	K	K	K						
31-32	K	K	K				K	S4	S128

[1] S bedeutet Spülbohrung, K bedeutet Kernbohrung, SK bedeutet Untersuchungen wurden sowohl an Spül- als auch an der Kernbohrung für diesen Teufenabschnitt durchgeführt

[2] Die S-Spezies umfassen den Gesamt-, Sulfid- und Sulfatschwefel

[3] Die Teufen der angewendeten Feldversuche entsprechen der Teufe der Filterstrecke.

Tabelle A6-6: Übersicht über Messstellen der Untersuchungen in Thülsfelde

Messstellen-Kurzbe-zeichnung	RECHTS-WERT	HOCH-WERT	GOK [m üNN]	Mess-bezugs-punkt (MBP) [m üNN]	Filter-unter-kante [m unter MBP]	Filter-ober-kante [m unter MBP]	Filter-unter-kante [m üNN]
183	3424760	5862260	36.1	36.5	45.0	43.0	-8.5
186	3431880	5864440	30.4	30.8	31.0	29.0	-0.2
216	3421240	5868700	19.0	19.5	10.5	8.5	9.0
226	3425359	5870443	16.7	17.2	30.0	28.0	-12.8
245	3423400	5870100	16.8	17.3	10.5	8.5	6.8
248	3423500	5861650	37.9	38.5	13.5	11.5	25.0
262	3426440	5867500	24.1	24.5	30.3	28.3	-5.9
265	3425560	5868400	20.5	20.9	9.4	7.4	11.5
269	3423880	5870970	16.2	16.6	8.1	6.1	8.5
276	3422580	5870250	16.7	17.1	30.0	28.0	-12.9
324	3429714	5869260	19.0	19.5	22.0	20.0	-2.5
335	3423720	5863920	32.8	33.3	15.0	13.0	18.3
336* (T336)	3423710	5863910	32.7	33.2	25.0	23.0	8.2
337	3423700	5863900	32.8	33.2	35.0	33.0	-1.8
343	3430500	5867200	22.0	22.5	8.6	6.6	13.9
353	3422374	5859146	34.7	35.2	27.7	23.7	7.5
354	3425348	5858854	34.6	35.0	27.2	23.2	7.8
355	3433800	5861930	37.9	38.4	26.8	22.8	11.6
366	3422678	5865095	25.8	26.3	10.0	8.0	16.3
368	3422137	5863405	35.1	35.4	24.1	22.1	11.3
369	3422539	5862612	31.7	32.1	10.0	8.0	22.1
370* (T370, T370W)	3424022	5863077	33.5	34.0	24.0	22.0	10.0
371	3424774	5863219	33.9	34.4	12.0	10.0	22.4
372	3426040	5863584	30.2	30.6	20.0	18.0	10.6
374	3426419	5865314	27.5	28.0	10.0	8.0	18.0
377	3424847	5863987	31.7	32.2	12.0	10.0	20.2
466	3429413	5867521	21.3	21.9	4.5	3.5	17.4
483* (T483)	3424122	5862889	*33.0*	*33.0*	11.0	9.0	*22.0*
SGM1	*3424225*	*5862830*	*32.8*	*32.2*	5.6	5.6	*26.6*
SGM3	*3424225*	*5862830*	*32.8*	*32.2*	15.6	15.6	*16.6*
SGM6	*3424225*	*5862830*	*32.8*	*32.2*	30.6	30.6	*1.6*
SGM7	*3424225*	*5862830*	*32.8*	*32.2*	35.6	35.6	*-3.5*

Anmerkung: Die Tabelle enthält die Stammdaten der Messstellen im Einzugsgebiet des Wasserwerkes Thülsfelde, an denen N_2/Ar- und N_2O-Messungen durchgeführt worden sind. An den mit *gekennzeichneten Messstellen wurden außerdem Einbohrloch-Tracertests durchgeführt, Bezeichnung in Klammern.

Tabelle A7-1: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W1

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W1/3**	**W1/2**	**W1/1**
	Bohrung		**2122**	**2122**	**2122**
	Teufe	m_GOK	27.5	27.5	27.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.245	0.245	0.245
	Masse Porenwasser		45	45	45
	Masse_ZugabeWasser		200	200	200
	M(Wasser)	g	261.398	261.398	261.398
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.261	0.261	0.261
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	151.940	151.940	151.940
	M(trocken)	g	250.602	250.602	250.602
0	Ausgangskonzentration	mg/L	120.540	120.000	120.690
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**31.509**	**31.368**	**31.548**
	Entnahme_Masse	mg	1.326	1.320	1.328
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse nach Befüllung	mg	31.854	31.719	31.892
2	β_gemessen	mg/L	117.320	118.360	118.500
	Masse an N	**mg**	**30.667**	**30.939**	**30.976**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.187	-0.780	-0.916
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.070	-0.703	-0.826
	Entnahme_Masse	mg	1.291	1.302	1.304
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	31.048	31.308	31.343
7	β_gemessen	mg/L	116.490	116.190	116.400
	Masse an N	**mg**	**30.450**	**30.372**	**30.427**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.598	-0.937	-0.917
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.608	-1.547	-1.652
	Entnahme_Masse	mg	1.281	1.278	1.280
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	30.840	30.765	30.818
21	β_gemessen	mg/L	117.240	117.040	117.990
	Masse an N	**mg**	**30.646**	**30.594**	**30.842**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.194	-0.171	0.025
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.783	-1.701	-1.629
	Entnahme_Masse	mg	1.290	1.287	1.298
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	31.028	30.978	31.216
84	β_gemessen	mg/L	107.120	109.550	107.810
	Masse an N	**mg**	**28.001**	**28.636**	**28.181**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.027	-2.342	-3.034
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.511	-3.811	-4.364
	Entnahme_Masse	mg	1.178	1.205	1.186
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	28.494	29.102	28.667
184	β_gemessen	mg/L	99.290	100.580	99.840
	Masse an N	**mg**	**25.954**	**26.291**	**26.098**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.540	-2.811	-2.569
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-6.799	-6.344	-6.678
	Entnahme_Masse	mg	1.092	1.106	1.098
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	26.533	26.856	26.671
275	β_gemessen	mg/L	73.580	69.320	71.860
	Masse an N	**mg**	**19.234**	**18.120**	**18.784**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-7.300	-8.736	-7.887
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-13.376	-14.216	-13.785
	Entnahme_Masse	mg	0.809	0.763	0.790
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	20.096	19.029	19.665
308	β_gemessen	mg/L		60.160	60.630
	Masse an N	**mg**		**15.726**	**15.849**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.303	-3.816
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-17.192	-17.224
	Entnahme_Masse	mg		0.662	0.667

	Zugabe_Masse	mg		1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg		16.735	16.853
365	β_gemessen	mg/L		48.760	47.450
	Masse an N	**mg**		**12.746**	**12.403**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.990	-4.450
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-20.787	-21.233
	Entnahme_Masse	mg		0.536	0.522
	Zugabe_Masse	mg		1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg		13.881	13.553
427	β_gemessen	mg/L		37.660	32.130
	Masse an N	**mg**		**9.844**	**8.399**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-4.036	-5.154
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-24.424	-25.877
	Entnahme_Masse	mg		0.414	0.353
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		39.460	38.075
490	β_gemessen	mg/L		128.580	114.260
	Masse an N	**mg**		**33.611**	**29.867**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-5.849	-8.208
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-29.695	-33.273
	Entnahme_Masse	mg		1.414	1.257
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		62.226	58.640
553	β_gemessen	mg/L		211.300	197.400
	Masse an N	**mg**		**55.233**	**51.600**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-6.993	-7.041
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-35.996	-39.617
	Entnahme_Masse	mg		2.324	2.171
	Zugabe_Masse	mg		1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg		54.580	51.100
570	β_gemessen	mg/L		203.650	
	Masse an N	**mg**		**53.234**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		39.353	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-0.536	-39.617
	Entnahme_Masse	mg		2.240	
	Zugabe_Masse	mg		1.671	
	Masse_nachBefüllung	mg		52.665	

Tabelle A7-2: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W2

Tage nach Beginn			**Parallelansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W2/3**	**W2/2**	**W2/1**
	Bohrung		**2122**	**2122**	**2122**
	Teufe	m_GOK	27.5	27.5	27.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.195	0.195	0.195
	Masse Porenwasser		50.912	50.912	50.912
	Masse_ZugabeWasser		200	200	200
	M(Wasser)	g	250.912	250.912	250.912
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.251	0.251	0.251
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	151.940	151.940	151.940
	M(trocken)	g	261.088	261.088	261.088
0	Ausgangskonzentration	mg/L	125.280	125.410	125.270
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**31.434**	**31.467**	**31.432**
	Entnahme_Masse	mg	1.378	1.380	1.378
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse nach Befüllung	mg	31.728	31.759	31.725
2	β_gemessen	mg/L	124.080	124.700	125.610
	Masse an N	**mg**	**31.133**	**31.289**	**31.517**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.594	-0.470	-0.208
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.514	-0.406	-0.180
	Entnahme_Masse	mg	1.365	1.372	1.382
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	31.440	31.588	31.807
7	β_gemessen	mg/L	119.900	120.140	120.010

	Masse an N	**mg**	**30.084**	**30.145**	**30.112**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.355	-1.444	-1.695
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.686	-1.655	-1.646
	Entnahme_Masse	mg	1.319	1.322	1.320
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	30.437	30.494	30.463
21	β_gemessen	mg/L	114.510	115.100	116.430
	Masse an N	**mg**	**28.732**	**28.880**	**29.214**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.705	-1.614	-1.249
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.161	-3.051	-2.726
	Entnahme_Masse	mg	1.260	1.266	1.281
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	29.144	29.285	29.604
84	β_gemessen	mg/L	101.490	101.070	99.740
	Masse an N	**mg**	**25.465**	**25.360**	**25.026**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.679	-3.926	-4.578
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-6.342	-6.446	-6.686
	Entnahme_Masse	mg	1.116	1.112	1.097
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	26.020	25.919	25.600
184	β_gemessen	mg/L	68.780	68.710	66.480
	Masse an N	**mg**	**17.258**	**17.240**	**16.681**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-8.762	-8.679	-8.920
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-13.920	-13.953	-14.400
	Entnahme_Masse	mg	0.757	0.756	0.731
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	18.172	18.156	17.621
275	β_gemessen	mg/L	44.520	36.140	36.630
	Masse an N	**mg**	**11.171**	**9.068**	**9.191**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-7.002	-9.088	-8.430
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-19.976	-21.812	-21.691
	Entnahme_Masse	mg	0.490	0.398	0.403
	Zugabe_Masse	mg	1.671	1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg	12.352	10.342	10.459
308	β_gemessen	mg/L		28.320	28.500
	Masse an N	**mg**		**7.106**	**7.151**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.236	-3.308
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-24.611	-24.552
	Entnahme_Masse	mg		0.312	0.314
	Zugabe_Masse	mg		1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg		8.466	8.509
365	β_gemessen	mg/L		18.560	19.030
	Masse an N	**mg**		**4.657**	**4.775**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.809	-3.734
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-27.905	-27.781
	Entnahme_Masse	mg		0.204	0.209
	Zugabe_Masse	mg		1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg		6.124	6.237
427	β_gemessen	mg/L		12.710	10.570
	Masse an N	**mg**		**3.189**	**2.652**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.935	-3.585
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-30.444	-30.882
	Entnahme_Masse	mg		0.140	0.116
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		33.079	32.566
490	β_gemessen	mg/L		112.000	103.400
	Masse an N	**mg**		**28.102**	**25.944**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-4.977	-6.622
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-34.748	-36.609
	Entnahme_Masse	mg		1.232	1.137
	Zugabe_Masse	mg		1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg		28.541	26.478
553	β_gemessen	mg/L		106.500	101.500
	Masse an N	**mg**		**26.722**	**25.468**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.819	-1.011
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-36.322	-37.483

	Entnahme_Masse	mg		1.172	1.117
	Zugabe_Masse	mg		1.671	1.671
	Masse_nachBefüllung	mg		27.222	26.022
570	β_gemessen	mg/L		105.400	
	Masse an N	**mg**		**26.446**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		20.322	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-18.746	-37.483
	Entnahme_Masse	mg		1.159	
	Zugabe_Masse	mg		1.671	
	Masse_nachBefüllung	mg		26.958	

Tabelle A7-3: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W3

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W3/3**	**W3/2**	**W3/1**
	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	42.5	42.5	42.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.26	0.26	0.26
	Masse_ZugabeWasser				
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	264.381	264.381	264.381
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.264	0.264	0.264
	β(T)_1	mg/L	160.050	160.050	160.050
	β(T)_2		160.050	160.050	160.050
	M(trocken)	g	247.619	247.619	247.619
0	Ausgangskonzentration	mg/L	121.880	121.530	121.560
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**32.223**	**32.130**	**32.138**
	Entnahme_Masse	mg	1.341	1.337	1.337
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse nach Befüllung	mg	32.643	32.554	32.562
2	β_gemessen	mg/L	116.320	114.320	117.130
	Masse an N	**mg**	**30.753**	**30.224**	**30.967**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.890	-2.330	-1.595
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.723	-2.125	-1.454
	Entnahme_Masse	mg	1.280	1.258	1.288
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	31.234	30.727	31.439
7	β_gemessen	mg/L	114.430	111.490	114.280
	Masse an N	**mg**	**30.253**	**29.476**	**30.213**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.981	-1.251	-1.226
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.618	-3.266	-2.572
	Entnahme_Masse	mg	1.259	1.226	1.257
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	30.755	30.010	30.717
21	β_gemessen	mg/L	112.440	111.520	111.610
	Masse an N	**mg**	**29.727**	**29.484**	**29.508**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.028	-0.526	-1.209
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.555	-3.746	-3.675
	Entnahme_Masse	mg	1.237	1.227	1.228
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	30.251	30.018	30.040
84	β_gemessen	mg/L	82.700	88.250	89.350
	Masse an N	**mg**	**21.864**	**23.332**	**23.622**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-8.386	-6.686	-6.418
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-11.203	-9.843	-9.527
	Entnahme_Masse	mg	0.910	0.971	0.983
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	22.715	24.121	24.400
184	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.740
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.196**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-22.715	-24.121	-24.204
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-31.917	-31.839	-31.600
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.008
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	1.761	1.761	1.948
189	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000

	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.761	-1.761	-1.948
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-33.522	-33.445	-33.376
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
196	β_gemessen	mg/L	99.400	97.550	100.410
	Masse an N	**mg**	**26.279**	**25.790**	**26.546**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.751	-4.240	-3.484
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-36.943	-37.311	-36.553
	Entnahme_Masse	mg	1.093	1.073	1.105
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	26.947	26.478	27.203
210	β_gemessen	mg/L	65.350	62.510	66.400
	Masse an N	**mg**	**17.277**	**16.526**	**17.555**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-9.669	-9.951	-9.648
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-45.760	-46.386	-45.350
	Entnahme_Masse	mg	0.719	0.688	0.730
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	18.319	17.599	18.585
275	β_gemessen	mg/L	1.700	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.449**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-17.870	-17.599	-18.585
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-62.056	-62.435	-62.298
	Entnahme_Masse	mg	0.019	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	2.191	1.761	1.761
294	β_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.761	-1.761
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-64.040	-63.904
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.030
301	β_gemessen	mg/L		87.010	90.580
	Masse an N	**mg**		**23.004**	**23.948**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.026	-6.082
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-70.447	-69.450
	Entnahme_Masse	mg		0.957	0.996
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		23.807	24.712
315	β_gemessen	mg/L		57.020	62.030
	Masse an N	**mg**		**15.075**	**16.400**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-8.732	-8.312
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-78.410	-77.030
	Entnahme_Masse	mg		0.627	0.682
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		16.208	17.478
350	β_gemessen	mg/L		0.000	1.490
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.394**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-16.208	-17.084
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-93.191	-92.609
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.016
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.408
365	β_gemessen	mg/L		60.410	73.900
	Masse an N	**mg**		**15.971**	**19.538**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-14.059	-10.870
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-106.011	-102.522
	Entnahme_Masse	mg		0.665	0.813
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		17.067	20.485
406	β_gemessen	mg/L		0.000	1.990
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.526**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-17.067	-19.959
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-121.575	-120.723

	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.022
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		1.761	2.265
413	β_gemessen	mg/L		0.000	0.500
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.132**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.761	-2.133
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-123.181	-122.667
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.006
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.157
420	β_gemessen	mg/L		96.530	99.390
	Masse an N	**mg**		**25.521**	**26.277**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-4.509	-3.880
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-127.293	-126.206
	Entnahme_Masse	mg		1.062	1.093
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		26.219	26.944
434	β_gemessen	mg/L		60.020	64.350
	Masse an N	**mg**		**15.868**	**17.013**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-10.351	-9.931
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-136.732	-135.262
	Entnahme_Masse	mg		0.660	0.708
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		16.968	18.066
469	β_gemessen	mg/L		0.560	2.030
	Masse an N	**mg**		**0.148**	**0.537**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-16.820	-17.529
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-152.071	-151.247
	Entnahme_Masse	mg		0.006	0.022
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		1.902	2.275
476	β_gemessen	mg/L		0.470	0.570
	Masse an N	**mg**		**0.124**	**0.151**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.778	-2.124
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-153.692	-153.184
	Entnahme_Masse	mg		0.005	0.006
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.149	30.174
497	β_gemessen	mg/L		72.120	74.570
	Masse an N	**mg**		**19.067**	**19.715**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-11.082	-10.460
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-163.798	-162.722
	Entnahme_Masse	mg		0.793	0.820
	Zugabe_Masse	mg		1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg		20.034	20.655

Tabelle A7-4: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W4

Tage nach Beginn			**Parallelansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W4/3**	**W4/2**	**W4/1**
	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	42.5	42.5	42.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	WG_Mittel	--	0.26	0.26	0.26
	M(Wasser)	g	264.381	264.381	264.381
	V(W.P)	L	0.264	0.264	0.264
	β(T)_1	mg/L	160.050	160.050	160.050
	β(T)_2		160.050	160.050	160.050
	M(trocken)	g	247.619	247.619	247.619
1	β_gemessen_24h	mg/L	120.090	119.460	119.890
	M()_24h_PN	**mg**	**31.750**	**31.583**	**31.697**
	Entnahme_M()_24h	mg	1.321	1.314	1.319
	Zugabe_M()_24h	mg	1.761	1.761	1.761
	M()_24h_nachBefüllung	mg	32.189	32.029	32.138
2	β_gemessen	mg/L	114.800	113.740	116.290

	Masse an N	**mg**	**30.351**	**30.071**	**30.745**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.838	-1.959	-1.394
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.676	-1.786	-1.271
	Entnahme_Masse	mg	1.263	1.251	1.279
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	30.849	30.580	31.226
7	β_gemessen	mg/L	111.980	112.160	112.210
	Masse an N	**mg**	**29.605**	**29.653**	**29.666**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.243	-0.927	-1.560
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.810	-2.632	-2.693
	Entnahme_Masse	mg	1.232	1.234	1.234
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	30.134	30.180	30.192
21	β_gemessen	mg/L	110.510	110.870	110.800
	Masse an N	**mg**	**29.217**	**29.312**	**29.293**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.917	-0.868	-0.899
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.647	-3.423	-3.513
	Entnahme_Masse	mg	1.216	1.220	1.219
	Zugabe_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Masse_nachBefüllung	mg	29.762	29.853	29.835
84	β_gemessen	mg/L	100.040	100.290	99.840
	β_gemessen	**mg**	**26.449**	**26.515**	**26.396**
	Masse an N	mg	-3.313	-3.338	-3.439
	Elimination E(t)_Masse	mg/kg N	-6.668	-6.467	-6.650
	Elimination E(t)_Konz.	mg	1.100	1.103	1.098
	Entnahme_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Zugabe_Masse	mg	27.109	27.172	27.058
184	Masse_nachBefüllung	mg/L	81.930	82.590	83.310
	β_gemessen	**mg**	**21.661**	**21.835**	**22.026**
	β_gemessen	mg	-5.448	-5.337	-5.033
	Masse an N	mg/kg N	-11.636	-11.334	-11.239
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.901	0.908	0.916
	Elimination E(t)_Konz.	mg	1.761	1.761	1.761
	Entnahme_Masse	mg	22.520	22.687	22.870
275	Zugabe_Masse	mg/L	47.620	52.300	48.760
	Masse_nachBefüllung	**mg**	**12.590**	**13.827**	**12.891**
	β_gemessen	mg	-9.930	-8.860	-9.979
	β_gemessen	mg/kg N	-20.691	-19.414	-20.338
	Masse an N	mg	0.524	0.575	0.536
	Elimination E(t)_Masse	mg	1.761	1.761	1.761
	Elimination E(t)_Konz.	mg	13.827	15.012	14.115
315	Entnahme_Masse	mg/L		40.660	42.570
	Zugabe_Masse	**mg**		**10.750**	**11.255**
	Masse_nachBefüllung	mg		-4.263	-2.861
	β_gemessen	mg/kg N		-23.301	-22.947
	β_gemessen	mg		0.447	0.468
	Masse an N	mg		1.761	1.761
	Elimination E(t)_Masse	mg		12.063	12.547
365	Elimination E(t)_Konz.	mg/L		33.100	34.590
	Entnahme_Masse	**mg**		**8.751**	**9.145**
	Zugabe_Masse	mg		-3.312	-3.402
	Masse_nachBefüllung	mg/kg N		-26.321	-26.049
	β_gemessen	mg		0.364	0.380
	β_gemessen	mg		1.761	1.761
	Masse an N	mg		10.147	10.525
427	Elimination E(t)_Masse	mg/L		18.430	23.130
	Elimination E(t)_Konz.	**mg**		**4.873**	**6.115**
	Entnahme_Masse	mg		-5.275	-4.410
	Zugabe_Masse	mg/kg N		-31.131	-30.071
	Masse_nachBefüllung	mg		0.203	0.254
	β_gemessen	mg		1.761	1.761
	β_gemessen	mg		6.430	7.621
490	**Masse an N**	mg/L		4.250	11.130
	Elimination E(t)_Masse	**mg**		**1.124**	**2.943**
	Elimination E(t)_Konz.	mg		-5.307	-4.679
	Entnahme_Masse	mg/kg N		-35.971	-34.337

	Zugabe_Masse	mg		0.047	0.122
	Masse_nachBefüllung	mg		1.761	1.761
	β_gemessen	mg		2.837	4.581
504	β_gemessen	mg/L		6.400	12.850
	Masse an N	**mg**		**1.692**	**3.397**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.145	-1.183
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-37.015	-35.416
	Entnahme_Masse	mg		0.070	0.141
	Zugabe_Masse	mg		30.300	30.300
	Masse_nachBefüllung	mg		31.922	33.556
525	β_gemessen	mg/L		113.880	117.260
	β_gemessen	**mg**		**30.108**	**31.001**
	Masse an N	mg		-1.814	-2.555
	Elimination E(t)_Masse	mg/kg N		-38.669	-37.746
	Elimination E(t)_Konz.	mg		1.253	1.290
	Entnahme_Masse	mg		1.761	1.761
	Zugabe_Masse	mg		30.616	31.472
570	β_gemessen	mg/L		102.450	
	Masse an N	**mg**		**27.086**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.530	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-41.888	
	Entnahme_Masse	mg		1.127	
	Zugabe_Masse	mg		1.761	
	Masse_nachBefüllung	mg		27.719	

Tabelle A7-5: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W5

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W5/3**	**W5/2**	**W5/1**
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	18.5	18.5	18.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	WG_Mittel	--	0.22	0.22	0.22
	M(Wasser)	g	256.262	256.262	256.262
	V(W.P)	L	0.256	0.256	0.256
	β(T)_1	mg/L	153.590	153.590	153.590
	β(T)_2				
	M(trocken)	g	255.738	255.738	255.738
0	Ausgangskonzentration	mg/L	136.240	136.690	136.940
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**34.913**	**35.028**	**35.093**
	Entnahme_Masse	mg	1.499	1.504	1.506
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse nach Befüllung	mg	35.104	35.214	35.276
2	β_gemessen	mg/L	134.160	134.510	133.140
	Masse an N	**mg**	**34.380**	**34.470**	**34.119**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.724	-0.745	-1.157
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.639	-0.657	-1.022
	Entnahme_Masse	mg	1.476	1.480	1.465
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	34.594	34.680	34.344
7	β_gemessen	mg/L	132.830	134.390	135.090
	Masse an N	**mg**	**34.039**	**34.439**	**34.618**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.555	-0.241	0.275
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.129	-0.870	-0.779
	Entnahme_Masse	mg	1.461	1.478	1.486
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	34.268	34.650	34.822
21	β_gemessen	mg/L	131.800	133.500	132.920
	Masse an N	**mg**	**33.775**	**34.211**	**34.062**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.492	-0.439	-0.760
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.563	-1.258	-1.450
	Entnahme_Masse	mg	1.450	1.469	1.462
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	34.015	34.432	34.290
84	β_gemessen	mg/L	133.190	133.500	132.920

	Masse an N	**mg**	**34.132**	**34.211**	**34.062**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.117	-0.221	-0.227
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.461	-1.453	-1.650
	Entnahme_Masse	mg	1.465	1.469	1.462
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	34.356	34.432	34.290
184	β_gemessen	mg/L	134.430	134.320	135.880
	Masse an N	**mg**	**34.449**	**34.421**	**34.821**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.093	-0.011	0.531
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.378	-1.462	-1.181
	Entnahme_Masse	mg	1.479	1.478	1.495
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	34.660	34.633	35.016
275	β_gemessen	mg/L	133.670	135.340	135.280
	Masse an N	**mg**	**34.255**	**34.683**	**34.667**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.406	0.049	-0.349
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.736	-1.419	-1.489
	Entnahme_Masse	mg	1.470	1.489	1.488
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	34.474	34.883	34.869
365	β_gemessen	mg/L		131.880	135.010
	Masse an N	**mg**		**33.796**	**34.598**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.087	-0.271
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-2.379	-1.728
	Entnahme_Masse	mg		1.451	1.485
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		34.035	34.802

Tabelle A7-6: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W6

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W6/3**	**W6/2**	**W6/1**
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	19.5	19.5	19.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	WG_Mittel	--	0.205	0.205	0.205
	M(Wasser)	g	253.079	253.079	253.079
	V(W.P)	L	0.253	0.253	0.253
	β(T)_1	mg/L	153.590	153.590	153.590
	M(trocken)	g	258.921	258.921	258.921
0	Ausgangskonzentration	mg/L	145.540	146.360	147.420
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**36.833**	**37.041**	**37.309**
	Entnahme_Masse	mg	1.601	1.610	1.622
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse nach Befüllung	mg	36.922	37.120	37.377
2	β_gemessen	mg/L	145.670	145.680	146.380
	Masse an N	**mg**	**36.866**	**36.869**	**37.046**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.056	-0.252	-0.331
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.082	-0.370	-0.487
	Entnahme_Masse	mg	1.602	1.602	1.610
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	36.953	36.956	37.125
7	β_gemessen	mg/L	145.170	145.240	145.940
	Masse an N	**mg**	**36.739**	**36.757**	**36.934**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.214	-0.198	-0.191
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.396	-0.662	-0.767
	Entnahme_Masse	mg	1.597	1.598	1.605
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	36.832	36.849	37.018
21	β_gemessen	mg/L	144.680	144.000	140.850
	Masse an N	**mg**	**36.615**	**36.443**	**35.646**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.217	-0.406	-1.372
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.714	-1.258	-2.785
	Entnahme_Masse	mg	1.591	1.584	1.549
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	36.713	36.549	35.786

84	β_gemessen	mg/L	144.650	143.560	141.000
	Masse an N	**mg**	**36.608**	**36.332**	**35.684**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.106	-0.217	-0.102
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.870	-1.577	-2.935
	Entnahme_Masse	mg	1.591	1.579	1.551
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	36.706	36.442	35.823
182	β_gemessen	mg/L	145.000	145.000	143.500
	Masse an N	**mg**	**36.696**	**36.696**	**36.317**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.010	0.254	0.494
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.884	-1.203	-2.208
	Entnahme_Masse	mg	1.595	1.595	1.579
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	36.791	36.791	36.428

Tabelle A7-7: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W7

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W7/3**	**W7/2**	**W7/1**
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	41.5	41.5	41.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.135	0.135	0.135
	Masse Porenwasser	g	200	200	200
	Masse_ZugabeWasser	g	37.1	37.1	37.1
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	237.110	237.110	237.110
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.237	0.237	0.237
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	153.590	153.590	153.590
	M(trocken)	g	274.890	274.890	274.890
0	Ausgangskonzentration	mg/L	130.570	129.820	131.930
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**30.959**	**30.782**	**31.282**
	Entnahme_Masse	mg	1.436	1.428	1.451
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse nach Befüllung	mg	31.213	31.043	31.520
2	β_gemessen	mg/L	127.850	128.250	126.720
	Masse an N	**mg**	**30.315**	**30.409**	**30.047**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.898	-0.634	-1.474
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.738	-0.521	-1.210
	Entnahme_Masse	mg	1.406	1.411	1.394
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	30.598	30.688	30.342
7	β_gemessen	mg/L	127.250	124.730	127.240
	Masse an N	**mg**	**30.172**	**29.575**	**30.170**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.425	-1.113	-0.172
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.087	-1.435	-1.352
	Entnahme_Masse	mg	1.400	1.372	1.400
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	30.462	29.892	30.460
21	β_gemessen	mg/L	103.310	104.010	103.720
	Masse an N	**mg**	**24.496**	**24.662**	**24.593**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-5.966	-5.230	-5.867
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-5.988	-5.732	-6.171
	Entnahme_Masse	mg	1.136	1.144	1.141
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	25.049	25.207	25.142
84	β_gemessen	mg/L	69.190	74.970	73.870
	Masse an N	**mg**	**16.406**	**17.776**	**17.515**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-8.643	-7.431	-7.626
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-13.088	-11.836	-12.436
	Entnahme_Masse	mg	0.761	0.825	0.813
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	17.334	18.641	18.392
182	β_gemessen	mg/L	46.320	61.260	54.360
	Masse an N	**mg**	**10.983**	**14.525**	**12.889**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-6.351	-4.116	-5.503
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-18.305	-15.217	-16.956

	Entnahme_Masse	mg	0.510	0.674	0.598
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	12.163	15.541	13.981
259	β_gemessen	mg/L	28.180	34.490	29.300
	Masse an N	**mg**	**6.682**	**8.178**	**6.947**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-5.481	-7.363	-7.034
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-22.808	-21.265	-22.734
	Entnahme_Masse	mg	0.310	0.379	0.322
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	8.061	9.488	8.315
308	β_gemessen	mg/L		20.330	21.940
	Masse an N	**mg**		**4.820**	**5.202**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-4.668	-3.112
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-25.099	-25.290
	Entnahme_Masse	mg		0.224	0.241
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		6.286	6.650
365	β_gemessen	mg/L		17.320	16.250
	Masse an N	**mg**		**4.107**	**3.853**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.180	-2.797
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-26.889	-27.588
	Entnahme_Masse	mg		0.191	0.179
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		5.606	5.364
427	β_gemessen	mg/L		13.960	12.300
	Masse an N	**mg**		**3.310**	**2.916**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.296	-2.447
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-28.775	-29.598
	Entnahme_Masse	mg		0.154	0.135
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		4.846	4.471
490	β_gemessen	mg/L		11.840	9.590
	Masse an N	**mg**		**2.807**	**2.274**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.039	-2.197
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-30.450	-31.403
	Entnahme_Masse	mg		0.130	0.105
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		4.367	3.858
504	β_gemessen	mg/L		11.300	9.170
	Masse an N	**mg**		**2.679**	**2.174**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.687	-1.684
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-31.836	-32.786
	Entnahme_Masse	mg		0.124	0.101
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		32.585	32.103
525	β_gemessen	mg/L		137.210	135.580
	Masse an N	**mg**		**32.534**	**32.147**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.051	0.044
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-31.878	-32.750
	Entnahme_Masse	mg		1.509	1.491
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		32.714	32.346
553	β_gemessen	mg/L		128.420	125.630
	Masse an N	**mg**		**30.450**	**29.788**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.264	-2.557
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-33.738	-34.851
	Entnahme_Masse	mg		1.413	1.382
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		30.727	30.096
570	β_gemessen	mg/L		122.960	
	Masse an N	**mg**		**29.155**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.571	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-35.029	-34.851

Tabelle A7-8: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W8

Tage nach Beginn	Parameter	Einheit	W8/3	W8/2	W8/1
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	42.5	42.5	42.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.12	0.12	0.12
	Masse Porenwasser		32.179	32.179	32.179
	Masse_ZugabeWasser		200	200	200
	M(Wasser)	g	233.429	233.429	233.429
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.233	0.233	0.233
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	153.590	153.590	153.590
	M(trocken)	g	278.571	278.571	278.571
0	Ausgangskonzentration	mg/L	136.700	138.940	136.870
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**31.910**	**32.433**	**31.949**
	Entnahme_Masse	mg	1.504	1.528	1.506
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse nach Befüllung	mg	32.095	32.594	32.133
2	β_gemessen	mg/L	133.220	133.140	134.380
	Masse an N	**mg**	**31.097**	**31.079**	**31.368**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.998	-1.515	-0.765
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.809	-1.228	-0.620
	Entnahme_Masse	mg	1.465	1.465	1.478
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	31.321	31.304	31.579
7	β_gemessen	mg/L	131.500	132.410	132.130
	Masse an N	**mg**	**30.696**	**30.908**	**30.843**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.626	-0.395	-0.737
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.316	-1.549	-1.217
	Entnahme_Masse	mg	1.447	1.457	1.453
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	30.939	31.141	31.079
21	β_gemessen	mg/L	122.750	121.390	122.590
	Masse an N	**mg**	**28.653**	**28.336**	**28.616**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.285	-2.805	-2.463
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.169	-3.823	-3.214
	Entnahme_Masse	mg	1.350	1.335	1.348
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	28.993	28.690	28.957
84	β_gemessen	mg/L	112.100	111.080	107.580
	Masse an N	**mg**	**26.167**	**25.929**	**25.112**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.825	-2.761	-3.845
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-5.459	-6.060	-6.330
	Entnahme_Masse	mg	1.233	1.222	1.183
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	26.624	26.397	25.618
184	β_gemessen	mg/L	104.600	104.260	96.500
	Masse an N	**mg**	**24.417**	**24.337**	**22.526**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.207	-2.060	-3.092
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-7.248	-7.730	-8.837
	Entnahme_Masse	mg	1.151	1.147	1.062
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	24.956	24.880	23.154
275	β_gemessen	mg/L	90.540	93.750	84.500
	Masse an N	**mg**	**21.135**	**21.884**	**19.725**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.821	-2.996	-3.429
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-10.345	-10.158	-11.617
	Entnahme_Masse	mg	0.996	1.031	0.930
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	21.828	22.542	20.485
308	β_gemessen	mg/L		83.050	67.370
	Masse an N	**mg**		**19.386**	**15.726**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.156	-4.759
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-12.717	-15.474
	Entnahme_Masse	mg		0.914	0.741
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689

	Masse_nachBefüllung	mg		20.162	16.675
365	β_gemessen	mg/L		81.000	59.360
	Masse an N	**mg**		**18.908**	**13.856**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.254	-2.818
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-13.733	-17.758
	Entnahme_Masse	mg		0.891	0.653
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		19.706	14.893
427	β_gemessen	mg/L		73.640	50.970
	Masse an N	**mg**		**17.190**	**11.898**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.517	-2.995
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-15.773	-20.186
	Entnahme_Masse	mg		0.810	0.561
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		18.069	13.027
490	β_gemessen	mg/L		68.190	41.560
	Masse an N	**mg**		**15.917**	**9.701**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.152	-3.325
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-17.517	-22.881
	Entnahme_Masse	mg		0.750	0.457
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		16.857	10.934
553	β_gemessen	mg/L		63.260	37.630
	Masse an N	**mg**		**14.767**	**8.784**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.090	-2.150
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-19.212	-24.624
	Entnahme_Masse	mg		0.696	0.414
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		15.760	10.059
570	β_gemessen	mg/L		62.820	
	Masse an N	**mg**		**14.664**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-5.042	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-23.299	

Tabelle A7-9: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W9

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W9/3**	**W9/2**	**W9/1**
	Bohrung		**2122**	**2122**	**2122**
	Teufe	m_GOK	27.5	27.5	27.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.3	0.3	0.3
	Masse Porenwasser	g	72	72	72
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	M(Wasser)	g	272.000	272.000	272.000
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.272	0.272	0.272
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	150.030	150.030	150.030
	M(trocken)	g	240.000	240.000	240.000
0	Ausgangskonzentration	mg/L	115.460	115.320	114.300
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**31.405**	**31.367**	**31.090**
	Entnahme_Masse	mg	1.270	1.269	1.257
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse nach Befüllung	mg	31.785	31.749	31.483
2	β_gemessen	mg/L	114.890	114.870	115.020
	Masse an N	**mg**	**31.250**	**31.245**	**31.285**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.535	-0.504	-0.197
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.504	-0.474	-0.186
	Entnahme_Masse	mg	1.264	1.264	1.265
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	31.637	31.631	31.671
7	β_gemessen	mg/L	113.290	113.220	113.300
	Masse an N	**mg**	**30.815**	**30.796**	**30.818**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.822	-0.836	-0.853
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.277	-1.261	-0.988
	Entnahme_Masse	mg	1.246	1.245	1.246
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650

	Masse_nachBefüllung	mg	31.219	31.201	31.222
21	β_gemessen	mg/L	113.220	113.420	112.610
	Masse an N	**mg**	**30.796**	**30.850**	**30.630**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.423	-0.351	-0.592
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.675	-1.590	-1.545
	Entnahme_Masse	mg	1.245	1.248	1.239
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	31.201	31.253	31.042
84	β_gemessen	mg/L	33.400	32.250	39.670
	Masse an N	**mg**	**9.085**	**8.772**	**10.790**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-22.116	-22.481	-20.251
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-22.483	-22.742	-20.598
	Entnahme_Masse	mg	0.367	0.355	0.436
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	10.368	10.068	12.004
184	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-10.368	-10.068	-12.004
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-32.238	-32.214	-31.893
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
196	β_gemessen	mg/L	112.380	111.370	111.130
	Masse an N	**mg**	**30.567**	**30.293**	**30.227**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.537	0.263	0.197
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-31.732	-31.967	-31.707
	Entnahme_Masse	mg	1.236	1.225	1.222
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	30.982	30.718	30.655
203	β_gemessen	mg/L	101.430	94.090	97.610
	Masse an N	**mg**	**27.589**	**25.592**	**26.550**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.393	-5.125	-4.105
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-34.924	-36.789	-35.570
	Entnahme_Masse	mg	1.116	1.035	1.074
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	28.124	26.208	27.127
217	β_gemessen	mg/L	74.130	56.290	67.560
	Masse an N	**mg**	**20.163**	**15.311**	**18.376**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-7.960	-10.897	-8.750
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-42.413	-47.042	-43.802
	Entnahme_Masse	mg	0.815	0.619	0.743
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	20.998	16.342	19.283
252	β_gemessen	mg/L	6.580	0.000	0.480
	Masse an N	**mg**	**1.790**	**0.000**	**0.131**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-28.240	-30.030	-29.899
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-68.983	-75.296	-71.933
	Entnahme_Masse	mg	0.072	0.000	0.005
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	3.368	1.650	1.776
275	β_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.650	-1.776
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-76.848	-73.604
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.030
294	β_gemessen	mg/L		83.350	89.880
	Masse an N	**mg**		**22.671**	**24.447**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.359	-5.583
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-83.772	-78.857
	Entnahme_Masse	mg		0.917	0.989
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		23.405	25.109
308	β_gemessen	mg/L		53.470	60.260
	Masse an N	**mg**		**14.544**	**16.391**

	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.798	-2.893
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-85.464	-81.578
	Entnahme_Masse	mg		0.588	0.663
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		15.606	17.378
343	β_gemessen	mg/L		0.690	0.680
	Masse an N	**mg**		**0.188**	**0.185**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-15.418	-17.193
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-99.970	-97.755
	Entnahme_Masse	mg		0.008	0.007
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.210	30.207
365	β_gemessen	mg/L		51.080	56.380
	Masse an N	**mg**		**13.894**	**15.335**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-16.316	-14.872
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-115.322	-111.747
	Entnahme_Masse	mg		0.562	0.620
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		14.982	16.366
399	β_gemessen	mg/L		0.000	1.710
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.465**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-14.982	-15.900
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-129.418	-126.707
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.019
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		1.650	2.097
406	β_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.650	-2.097
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-130.971	-128.680
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.030
413	β_gemessen	mg/L		89.440	90.450
	Masse an N	**mg**		**24.328**	**24.602**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-5.702	-5.428
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-136.336	-133.787
	Entnahme_Masse	mg		0.984	0.995
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		24.994	25.258
427	β_gemessen	mg/L		39.410	44.490
	Masse an N	**mg**		**10.720**	**12.101**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-14.275	-13.157
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-149.766	-146.165
	Entnahme_Masse	mg		0.434	0.489
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		40.316	41.642
462	β_gemessen	mg/L		15.500	26.730
	Masse an N	**mg**		**4.216**	**7.271**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-36.100	-34.371
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-183.731	-178.504
	Entnahme_Masse	mg		0.171	0.294
	Zugabe_Masse	mg		60.060	60.060
	Masse_nachBefüllung	mg		64.106	67.037
469	β_gemessen	mg/L		215.700	216.260
	Masse an N	**mg**		**58.670**	**58.823**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-5.435	-8.214
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-188.845	-186.232
	Entnahme_Masse	mg		2.373	2.379
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		86.328	86.474
483	β_gemessen	mg/L		281.570	289.880
	Masse an N	**mg**		**76.587**	**78.847**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-9.741	-7.626
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-198.009	-193.407
	Entnahme_Masse	mg		3.097	3.189

	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		103.520	105.689
497	β_gemessen	mg/L		344.740	340.060
	Masse an N	**mg**		**93.769**	**92.496**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-9.750	-13.192
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-207.183	-205.819
	Entnahme_Masse	mg		3.792	3.741
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		91.627	90.406
525	β_gemessen	mg/L		262.460	266.330
	Masse an N	**mg**		**71.389**	**72.442**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-20.238	-17.964
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-226.225	-222.721
	Entnahme_Masse	mg		2.887	2.930
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		70.152	71.162
553	β_gemessen	mg/L		157.350	179.210
	Masse an N	**mg**		**42.799**	**48.745**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-27.353	-22.417
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-251.960	-243.813
	Entnahme_Masse	mg		1.731	1.971
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		42.719	48.424
570	β_gemessen	mg/L		98.550	87.650
	Masse an N	**mg**		**26.806**	**23.841**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-15.913	-24.583
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-266.932	-266.942

Tabelle A7-10: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W10

Tage nach Beginn			**Parallelansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W10/3**	**W10/2**	**W10/1**
	Bohrung		**2122**	**2122**	**2122**
	Teufe	m_GOK	27.5	27.5	27.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.2	0.2	0.2
	Masse Porenwasser	g	52	52	52
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	M(Wasser)	g	252.000	252.000	252.000
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.252	0.252	0.252
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	150.030	150.030	150.030
	M(trocken)	g	260.000	260.000	260.000
0	Ausgangskonzentration	mg/L	119.910	119.410	118.300
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**30.217**	**30.091**	**29.812**
	Entnahme_Masse	mg	1.319	1.314	1.301
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse nach Befüllung	mg	30.549	30.428	30.161
2	β_gemessen	mg/L	118.910	118.640	118.760
	Masse an N	**mg**	**29.965**	**29.897**	**29.928**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.583	-0.531	-0.233
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.507	-0.461	-0.202
	Entnahme_Masse	mg	1.308	1.305	1.306
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	30.308	30.243	30.271
7	β_gemessen	mg/L	118.310	118.840	118.520
	Masse an N	**mg**	**29.814**	**29.948**	**29.867**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.494	-0.295	-0.404
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.935	-0.717	-0.554
	Entnahme_Masse	mg	1.301	1.307	1.304
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	30.163	30.291	30.214
21	β_gemessen	mg/L	117.550	118.320	118.520
	Masse an N	**mg**	**29.623**	**29.817**	**29.867**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.540	-0.474	-0.347
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.405	-1.129	-0.855
	Entnahme_Masse	mg	1.293	1.302	1.304
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650

	Masse_nachBefüllung	mg	29.980	30.165	30.214
84	β_gemessen	mg/L	116.750	116.670	116.570
	Masse an N	**mg**	**29.421**	**29.401**	**29.376**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.559	-0.765	-0.838
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.890	-1.793	-1.583
	Entnahme_Masse	mg	1.284	1.283	1.282
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	29.787	29.768	29.744
184	β_gemessen	mg/L	112.640	114.280	114.350
	Masse an N	**mg**	**28.385**	**28.799**	**28.816**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.402	-0.969	-0.928
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.107	-2.635	-2.388
	Entnahme_Masse	mg	1.239	1.257	1.258
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	28.797	29.192	29.209
275	β_gemessen	mg/L	100.230	99.920	99.220
	Masse an N	**mg**	**25.258**	**25.180**	**25.003**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.539	-4.012	-4.205
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-6.181	-6.119	-6.040
	Entnahme_Masse	mg	1.103	1.099	1.091
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	25.806	25.731	25.562
308	β_gemessen	mg/L		73.180	74.630
	Masse an N	**mg**		**18.441**	**18.807**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.290	-6.756
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-12.450	-11.907
	Entnahme_Masse	mg		0.805	0.821
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		19.287	19.636
365	β_gemessen	mg/L		56.290	67.560
	Masse an N	**mg**		**14.185**	**17.025**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-5.102	-2.611
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-16.881	-14.175
	Entnahme_Masse	mg		0.619	0.743
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		15.216	17.932
420	β_gemessen	mg/L		34.650	42.700
	Masse an N	**mg**		**8.732**	**10.760**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-6.484	-7.172
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-22.512	-20.404
	Entnahme_Masse	mg		0.381	0.470
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		38.381	40.321
483	β_gemessen	mg/L		119.700	125.400
	Masse an N	**mg**		**30.164**	**31.601**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-8.216	-8.720
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-29.648	-27.977
	Entnahme_Masse	mg		1.317	1.379
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		58.878	60.251
539	β_gemessen	mg/L		198.000	202.000
	Masse an N	**mg**		**49.896**	**50.904**
	Elimination E(t)_Masse	mg		34.680	32.972
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		0.471	0.659
	Entnahme_Masse	mg		2.178	2.222
	Zugabe_Masse	mg		1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg		49.368	50.332
570	β_gemessen	mg/L		187.000	
	Masse an N	**mg**		**47.124**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.244	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-1.478	

Tabelle A7-11: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W11

Tage nach Beginn			**Parallelansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W11/3**	**W11/2**	**W11/1**

	Bohrung		**2122**	**2122**	**2122**
	Teufe	m_GOK	38.5	38.5	38.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.14	0.14	0.14
	Masse Porenwasser	g	38.3	38.3	38.3
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	238.316	238.316	238.316
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.238	0.238	0.238
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	150.030	150.030	150.030
	M(trocken)	g	273.684	273.684	273.684
0	Ausgangskonzentration	mg/L	141.590	141.690	141.650
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**33.743**	**33.767**	**33.757**
	Entnahme_Masse	mg	1.557	1.559	1.558
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse nach Befüllung	mg	33.836	33.859	33.850
2	β_gemessen	mg/L	141.590	141.490	141.450
	Masse an N	**mg**	**33.743**	**33.719**	**33.710**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.093	-0.139	-0.140
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.077	-0.115	-0.115
	Entnahme_Masse	mg	1.557	1.556	1.556
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	33.836	33.813	33.804
7	β_gemessen	mg/L	142.440	143.440	142.760
	Masse an N	**mg**	**33.946**	**34.184**	**34.022**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.110	0.371	0.218
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	0.014	0.191	0.064
	Entnahme_Masse	mg	1.567	1.578	1.570
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	34.029	34.257	34.102
21	β_gemessen	mg/L	140.100	139.610	140.550
	Masse an N	**mg**	**33.388**	**33.271**	**33.495**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.641	-0.985	-0.607
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.515	-0.622	-0.436
	Entnahme_Masse	mg	1.541	1.536	1.546
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	33.497	33.386	33.600
84	β_gemessen	mg/L	140.800	140.330	140.590
	Masse an N	**mg**	**33.555**	**33.443**	**33.505**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.058	0.057	-0.095
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.468	-0.575	-0.514
	Entnahme_Masse	mg	1.549	1.544	1.546
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	33.656	33.550	33.609
184	β_gemessen	mg/L	140.500	139.330	139.110
	Masse an N	**mg**	**33.483**	**33.205**	**33.152**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.173	-0.345	-0.457
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.610	-0.860	-0.891
	Entnahme_Masse	mg	1.546	1.533	1.530
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	33.588	33.322	33.272
275	β_gemessen	mg/L	140.310	138.930	138.300
	Masse an N	**mg**	**33.438**	**33.109**	**32.959**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.150	-0.213	-0.313
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.734	-1.035	-1.149
	Entnahme_Masse	mg	1.543	1.528	1.521
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	33.545	33.231	33.088
365	β_gemessen	mg/L		137.010	137.610
	Masse an N	**mg**		**32.652**	**32.795**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.580	-0.293
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.734	-1.514	-1.392

Tabelle A7-12: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W12

Tage nach Beginn			**Paralellansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W12/3**	**W12/2**	**W12/3**

	Bohrung		**2122**	**2122**	**2122**
	Teufe	m_GOK	45	45	45
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.13	0.13	0.13
	Masse Porenwasser	g	35.89	35.89	35.89
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	235.894	235.894	235.894
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.236	0.236	0.236
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	150.030	150.030	150.030
	M(trocken)	g	276.106	276.106	276.106
0	Ausgangskonzentration	mg/L	135.150	135.230	135.100
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**31.881**	**31.900**	**31.869**
	Entnahme_Masse	mg	1.487	1.488	1.486
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse nach Befüllung	mg	32.045	32.063	32.033
2	β_gemessen	mg/L	134.620	135.280	135.510
	Masse an N	**mg**	**31.756**	**31.912**	**31.966**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.289	-0.151	-0.068
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.236	-0.123	-0.055
	Entnahme_Masse	mg	1.481	1.488	1.491
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	31.926	32.074	32.126
7	β_gemessen	mg/L	136.220	136.220	135.580
	Masse an N	**mg**	**32.133**	**32.133**	**31.982**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.208	0.059	-0.143
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.066	-0.075	-0.172
	Entnahme_Masse	mg	1.498	1.498	1.491
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	32.285	32.285	32.141
21	β_gemessen	mg/L	136.070	136.090	136.080
	Masse an N	**mg**	**32.098**	**32.103**	**32.100**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.187	-0.183	-0.041
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.219	-0.224	-0.206
	Entnahme_Masse	mg	1.497	1.497	1.497
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	32.252	32.256	32.254
84	β_gemessen	mg/L	135.670	134.190	135.790
	Masse an N	**mg**	**32.004**	**31.655**	**32.032**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.248	-0.602	-0.222
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.422	-0.716	-0.387
	Entnahme_Masse	mg	1.492	1.476	1.494
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	32.162	31.829	32.189
184	β_gemessen	mg/L	132.590	132.680	131.630
	Masse an N	**mg**	**31.277**	**31.298**	**31.051**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.885	-0.530	-1.138
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.145	-1.150	-1.318
	Entnahme_Masse	mg	1.458	1.459	1.448
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	31.469	31.489	31.253
275	β_gemessen	mg/L	135.670	130.330	132.540
	Masse an N	**mg**	**32.004**	**30.744**	**31.265**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.535	-0.745	0.012
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.708	-1.759	-1.308
	Entnahme_Masse	mg	1.492	1.434	1.458
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	32.162	30.961	31.458
365	β_gemessen	mg/L		129.590	131.780
	Masse an N	**mg**		**30.569**	**31.086**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.391	-0.372
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-2.079	-1.612

Tabelle A7-13: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W13

Tage nach Beginn		**Parallelansätze**			
	Parameter	**Einheit**	**W13/3**	**W13/2**	**W13/1**

	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	35.5	35.5	35.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.21	0.21	0.21
	Masse Porenwasser	g	54.15	54.15	54.15
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	254.149	254.149	254.149
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.254	0.254	0.254
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	151.270	151.270	151.270
	M(trocken)	g	257.851	257.851	257.851
0	Ausgangskonzentration	mg/L	123.050	122.260	127.020
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**31.273**	**31.072**	**32.282**
	Entnahme_Masse	mg	1.354	1.345	1.397
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse nach Befüllung	mg	31.583	31.391	32.549
2	β_gemessen	mg/L	122.930	123.560	123.260
	Masse an N	**mg**	**31.243**	**31.403**	**31.326**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.341	0.011	-1.222
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.299	0.010	-1.070
	Entnahme_Masse	mg	1.352	1.359	1.356
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	31.554	31.707	31.634
7	β_gemessen	mg/L	123.210	122.230	121.400
	Masse an N	**mg**	**31.314**	**31.065**	**30.854**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.241	-0.643	-0.781
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.509	-0.553	-1.754
	Entnahme_Masse	mg	1.355	1.345	1.335
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	31.622	31.384	31.182
21	β_gemessen	mg/L	109.770	110.460	110.720
	Masse an N	**mg**	**27.898**	**28.073**	**28.139**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.724	-3.311	-3.043
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.771	-3.452	-4.419
	Entnahme_Masse	mg	1.207	1.215	1.218
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	28.354	28.522	28.585
84	β_gemessen	mg/L	32.300	34.140	32.560
	Masse an N	**mg**	**8.209**	**8.677**	**8.275**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-20.145	-19.846	-20.310
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-21.413	-20.832	-22.205
	Entnahme_Masse	mg	0.355	0.376	0.358
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	9.518	9.965	9.581
184	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.370
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.094**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-9.518	-9.965	-9.487
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-29.747	-29.558	-30.513
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.004
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	1.664	1.664	1.754
196	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.664	-1.664	-1.754
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-31.205	-31.015	-32.049
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
203	β_gemessen	mg/L	104.840	99.180	99.430
	Masse an N	**mg**	**26.645**	**25.206**	**25.270**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.385	-4.824	-4.760
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-34.169	-35.239	-36.217
	Entnahme_Masse	mg	1.153	1.091	1.094
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	27.156	25.779	25.840
217	β_gemessen	mg/L	46.600	46.380	45.460
	Masse an N	**mg**	**11.843**	**11.787**	**11.554**

	Elimination E(t)_Masse	mg	-15.312	-13.992	-14.287
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-47.578	-47.493	-48.729
	Entnahme_Masse	mg	0.513	0.510	0.500
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	12.995	12.941	12.718
252	β_gemessen	mg/L	0.790	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.201**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-12.794	-12.941	-12.718
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-58.782	-58.826	-59.866
	Entnahme_Masse	mg	0.009	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	1.856	1.664	1.664
275	β_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	Versuch	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	aufgelöst	-1.664	-1.664
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	(Sediment-	-60.283	-61.323
	Entnahme_Masse	mg	analyse für	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	AG lt. Angebot)	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.030
294	β_gemessen	mg/L		87.570	87.700
	Masse an N	**mg**		**22.256**	**22.289**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.774	-7.741
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-67.091	-68.102
	Entnahme_Masse	mg		0.963	0.965
	Zugabe_Masse	mg		1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg		22.957	22.988
308	β_gemessen	mg/L		33.730	34.400
	Masse an N	**mg**		**8.572**	**8.743**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-14.384	-14.245
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-79.687	-80.577
	Entnahme_Masse	mg		0.371	0.378
	Zugabe_Masse	mg		1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg		9.865	10.028
343	β_gemessen	mg/L		0.000	1.620
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.412**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-9.865	-9.617
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-88.327	-88.998
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.018
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.424
365	β_gemessen	mg/L		26.940	27.990
	Masse an N	**mg**		**6.847**	**7.114**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-23.183	-23.310
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-108.629	-109.412
	Entnahme_Masse	mg		0.296	0.308
	Zugabe_Masse	mg		1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg		8.214	8.470
399	β_gemessen	mg/L		0.000	0.600
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.152**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-8.214	-8.317
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-115.822	-116.695
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.007
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.176
406	β_gemessen	mg/L		89.540	89.500
	Masse an N	**mg**		**22.756**	**22.746**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.274	-7.430
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-122.192	-123.202
	Entnahme_Masse	mg		0.985	0.985
	Zugabe_Masse	mg		1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg		23.436	23.426
420	β_gemessen	mg/L		37.540	39.500
	Masse an N	**mg**		**9.541**	**10.039**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-13.895	-13.387
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-134.360	-134.925
	Entnahme_Masse	mg		0.413	0.435

	Zugabe_Masse	mg		1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg		10.792	11.268
462	β_gemessen	mg/L		0.000	0.690
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.175**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-10.792	-11.093
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-143.810	-144.639
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.008
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.198
483	β_gemessen	mg/L		70.540	66.100
	Masse an N	**mg**		**17.928**	**16.799**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-12.102	-13.399
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-154.409	-156.373
	Entnahme_Masse	mg		0.776	0.727
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		47.182	46.102
525	β_gemessen	mg/L		125.630	118.540
	Masse an N	**mg**		**31.929**	**30.127**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-15.253	-15.975
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-167.766	-170.363
	Entnahme_Masse	mg		1.382	1.304
	Zugabe_Masse	mg		1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg		32.211	30.487
570	β_gemessen	mg/L		47.200	46.620
	Masse an N	**mg**		**11.996**	**11.848**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-20.215	-18.638
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-185.469	-186.685

Tabelle A7-14: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W14

Tage nach Beginn			**Parallelansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W14/3**	**W14/2**	**W14/1**
	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	40.5	40.5	40.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.265	0.265	0.265
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	M(Wasser)	g	265.360	265.360	265.360
	V(W.P)	L	0.265	0.265	0.265
	c(T)_1	mg/L	151.270	151.270	151.270
	c(T)_2	mg/L	153.590	153.590	153.590
	M(trocken)	g	246.640	246.640	246.640
0	Ausgangskonzentration	mg/L	114.910	114.810	118.290
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**30.492**	**30.466**	**31.389**
	Entnahme_Masse	mg	1.264	1.263	1.301
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse nach Befüllung	mg	30.892	30.867	31.752
2	β_gemessen	mg/L	116.810	115.300	115.370
	Masse an N	**mg**	**30.997**	**30.596**	**30.615**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.104	-0.271	-1.138
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	0.095	-0.248	-1.042
	Entnahme_Masse	mg	1.285	1.268	1.269
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	31.376	30.992	31.009
7	β_gemessen	mg/L	113.150	113.900	112.990
	Masse an N	**mg**	**30.025**	**30.224**	**29.983**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.350	-0.767	-1.026
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.141	-0.951	-1.981
	Entnahme_Masse	mg	1.245	1.253	1.243
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	30.445	30.636	30.404
21	β_gemessen	mg/L	109.750	110.930	111.360
	Masse an N	**mg**	**29.123**	**29.436**	**29.550**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.322	-1.199	-0.854
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.351	-2.048	-2.763
	Entnahme_Masse	mg	1.207	1.220	1.225

	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	29.580	29.880	29.989
84	β_gemessen	mg/L	83.760	84.130	85.950
	Masse an N	**mg**	**22.227**	**22.325**	**22.808**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-7.353	-7.555	-7.182
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-9.083	-8.966	-9.338
	Entnahme_Masse	mg	0.921	0.925	0.945
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	22.969	23.063	23.526
184	β_gemessen	mg/L	8.760	18.800	20.500
	Masse an N	**mg**	**2.325**	**4.989**	**5.440**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-20.645	-18.074	-18.086
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-27.984	-25.513	-25.896
	Entnahme_Masse	mg	0.096	0.207	0.226
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	3.892	6.446	6.878
217	β_gemessen	mg/L	0.000	4.360	4.770
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**1.157**	**1.266**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.892	-5.289	-5.613
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-31.547	-30.355	-31.035
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.048	0.052
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	1.689	2.798	2.903
259	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.689	-2.798	-2.903
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-33.094	-32.918	-33.693
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	1.689	1.689	1.689
275	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.550
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.146**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.689	-1.689	-1.544
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-34.641	-34.464	-35.106
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.006
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.170
294	β_gemessen	mg/L		109.580	109.710
	Masse an N	**mg**		**29.078**	**29.113**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.952	-1.057
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-35.336	-36.074
	Entnahme_Masse	mg		1.205	1.207
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		29.562	29.595
308	β_gemessen	mg/L		96.620	97.400
	Masse an N	**mg**		**25.639**	**25.846**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.923	-3.749
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-38.928	-39.506
	Entnahme_Masse	mg		1.063	1.071
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		26.266	26.464
364	β_gemessen	mg/L		68.370	63.700
	Masse an N	**mg**		**18.143**	**16.903**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-8.123	-9.561
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-46.365	-48.259
	Entnahme_Masse	mg		0.752	0.701
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		19.080	17.892
420	β_gemessen	mg/L		22.060	16.680
	Masse an N	**mg**		**5.854**	**4.426**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-13.226	-13.466
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-58.474	-60.588
	Entnahme_Masse	mg		0.243	0.183
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		7.301	5.932
455	β_gemessen	mg/L		0.000	0.640

	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.170**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.301	-5.762
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-65.158	-65.864
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.007
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.193
462	β_gemessen	mg/L		103.930	103.700
	Masse an N	**mg**		**27.579**	**27.518**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.451	-2.675
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-67.402	-68.313
	Entnahme_Masse	mg		1.143	1.141
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		28.125	28.067
483	β_gemessen	mg/L		91.190	91.090
	Masse an N	**mg**		**24.198**	**24.172**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.927	-3.895
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-70.997	-71.879
	Entnahme_Masse	mg		1.003	1.002
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		24.885	24.859
553	β_gemessen	mg/L		26.140	27.110
	Masse an N	**mg**		**6.937**	**7.194**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-17.948	-17.665
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-87.429	-88.052
	Entnahme_Masse	mg		0.288	0.298
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		8.338	8.585
570	β_gemessen	mg/L		18.170	
	Masse an N	**mg**		**4.822**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.517	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-90.649	-88.052

Tabelle A7-15: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W15

Tage nach Beginn	Parameter	Einheit	Parallelansätze W15/3	W15/2	W15/1
	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	41.5	41.5	41.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.225	0.225	0.225
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	257.306	257.306	257.306
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.257	0.257	0.257
	c(β)_1	mg/L	151.270	151.270	151.270
	c(β)_2		153.590	153.590	153.590
	M(trocken)	g	254.694	254.694	254.694
0	Ausgangskonzentration	mg/L	124.490	123.060	122.410
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**32.032**	**31.664**	**31.497**
	Entnahme_Masse	mg	1.369	1.354	1.347
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse nach Befüllung	mg	32.327	31.974	31.814
2	β_gemessen	mg/L	119.700	120.350	121.610
	Masse an N	**mg**	**30.800**	**30.967**	**31.291**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.527	-1.008	-0.523
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.354	-0.893	-0.464
	Entnahme_Masse	mg	1.317	1.324	1.338
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	31.147	31.307	31.617
7	β_gemessen	mg/L	117.700	117.730	121.180
	Masse an N	**mg**	**30.285**	**30.293**	**31.180**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.862	-1.014	-0.437
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.118	-1.793	-0.851
	Entnahme_Masse	mg	1.295	1.295	1.333
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	30.654	30.662	31.511
21	β_gemessen	mg/L	113.620	113.030	114.230
	Masse an N	**mg**	**29.235**	**29.083**	**29.392**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.419	-1.578	-2.119
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.376	-3.192	-2.730
	Entnahme_Masse	mg	1.250	1.243	1.257
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	29.649	29.504	29.800
84	β_gemessen	mg/L	75.990	67.580	71.860
	Masse an N	**mg**	**19.553**	**17.389**	**18.490**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-10.097	-12.115	-11.310
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-12.328	-13.933	-12.757
	Entnahme_Masse	mg	0.836	0.743	0.790
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	20.381	18.309	19.364
184	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.940
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.242**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-20.381	-18.309	-19.122
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-30.397	-30.166	-29.710
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.010
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	1.664	1.664	1.895
196	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.390
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.100**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.664	-1.664	-1.795
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-31.872	-31.641	-31.301
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.004
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.126
203	β_gemessen	mg/L	104.050	104.440	108.210
	Masse an N	**mg**	**26.773**	**26.873**	**27.843**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.257	-3.157	-2.283
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-34.760	-34.440	-33.325
	Entnahme_Masse	mg	1.145	1.149	1.190
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664

	Masse_nachBefüllung	mg	27.292	27.388	28.317
217	β_gemessen	mg/L	70.390	69.670	72.130
	Masse an N	**mg**	**18.112**	**17.927**	**18.559**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-9.180	-9.462	-9.757
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-42.899	-42.828	-41.976
	Entnahme_Masse	mg	0.774	0.766	0.793
	Zugabe_Masse	mg	1.664	1.664	1.664
	Masse_nachBefüllung	mg	19.001	18.824	19.430
252	β_gemessen	mg/L	1.010	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.260**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-18.742	-18.824	-19.430
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-59.515	-59.517	-59.202
	Entnahme_Masse	mg	0.011	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.689	1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg	1.938	1.689	1.689
275	β_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.689	-1.689
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-61.015	-60.700
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.030
294	β_gemessen	mg/L		93.660	91.380
	Masse an N	**mg**		**24.099**	**23.513**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-5.931	-6.517
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-66.273	-66.478
	Entnahme_Masse	mg		1.030	1.005
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		24.759	24.197
308	β_gemessen	mg/L		52.760	49.450
	Masse an N	**mg**		**13.575**	**12.724**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-11.183	-11.473
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-76.188	-76.650
	Entnahme_Masse	mg		0.580	0.544
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		14.685	13.869
343	β_gemessen	mg/L		0.000	0.930
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.239**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-14.685	-13.630
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-89.207	-88.734
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.010
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.259
365	β_gemessen	mg/L		45.610	52.510
	Masse an N	**mg**		**11.736**	**13.511**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-18.294	-16.748
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-105.426	-103.583
	Entnahme_Masse	mg		0.502	0.578
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		12.924	14.623
399	β_gemessen	mg/L		0.000	1.190
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.306**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-12.924	-14.317
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-116.884	-116.276
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.013
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.323
406	β_gemessen	mg/L		93.470	94.540
	Masse an N	**mg**		**24.050**	**24.326**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-5.980	-5.997
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-122.185	-121.593
	Entnahme_Masse	mg		1.028	1.040
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		24.712	24.975
420	β_gemessen	mg/L		49.330	54.260
	Masse an N	**mg**		**12.693**	**13.961**

	Elimination E(t)_Masse	mg		-12.019	-11.014
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-132.841	-131.357
	Entnahme_Masse	mg		0.543	0.597
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		13.840	15.054
462	β_gemessen	mg/L		0.310	83.000
	Masse an N	**mg**		**0.080**	**21.356**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-13.760	6.302
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-145.040	-125.770
	Entnahme_Masse	mg		0.003	0.913
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.106	50.473
483	β_gemessen	mg/L		70.110	75.460
	Masse an N	**mg**		**18.040**	**19.416**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-12.067	-31.057
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-155.738	-153.305
	Entnahme_Masse	mg		0.771	0.830
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		47.299	48.616
525	β_gemessen	mg/L		118.400	117.960
	Masse an N	**mg**		**30.465**	**30.352**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-16.833	-18.264
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-170.663	-169.497
	Entnahme_Masse	mg		1.302	1.298
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		30.852	30.744
546	β_gemessen	mg/L		53.630	60.800
	Masse an N	**mg**		**13.799**	**15.644**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-17.053	-15.100
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-185.781	-182.884
	Entnahme_Masse	mg		0.590	0.669
	Zugabe_Masse	mg		1.689	1.689
	Masse_nachBefüllung	mg		14.899	16.665
567	β_gemessen	mg/L		1.870	
	Masse an N	**mg**		**0.481**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-14.418	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-198.564	
	Entnahme_Masse	mg		0.021	
	Zugabe_Masse	mg		1.689	
	Masse_nachBefüllung	mg		11.100	
570	β_gemessen	mg/L		0.200	
	Masse an N	**mg**		**0.103**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-10.997	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-208.314	

Tabelle A7-16: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W16

Tage nach Beginn			**Parallelansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W16/3**	**W16/2**	**W16/1**
	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	44.5	44.5	44.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.22	0.22	0.22
	Masse_ZugabeWasser	L	0.2	0.2	0.2
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	256.262	256.262	256.262
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.256	0.256	0.256
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	146.740	146.740	146.740
	M(trocken)	g	255.738	255.738	255.738
0	Ausgangskonzentration	mg/L	117.490	117.300	117.840
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**30.108**	**30.060**	**30.198**
	Entnahme_Masse	mg	1.292	1.290	1.296
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse nach Befüllung	mg	30.430	30.383	30.516
2	β_gemessen	mg/L	118.440	118.360	118.360
	Masse an N	**mg**	**30.352**	**30.331**	**30.331**

	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.078	-0.052	-0.185
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.069	-0.046	-0.163
	Entnahme_Masse	mg	1.303	1.302	1.302
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	30.663	30.643	30.643
7	β_gemessen	mg/L	113.670	113.370	116.750
	Masse an N	**mg**	**29.129**	**29.052**	**29.919**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.534	-1.591	-0.725
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.423	-1.451	-0.803
	Entnahme_Masse	mg	1.250	1.247	1.284
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	29.493	29.420	30.249
21	β_gemessen	mg/L	112.650	113.540	113.400
	Masse an N	**mg**	**28.868**	**29.096**	**29.060**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.625	-0.324	-1.188
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.975	-1.736	-1.852
	Entnahme_Masse	mg	1.239	1.249	1.247
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	29.243	29.461	29.427
84	β_gemessen	mg/L	100.110	100.420	104.700
	Masse an N	**mg**	**25.654**	**25.734**	**26.831**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.589	-3.727	-2.596
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-5.144	-5.028	-4.145
	Entnahme_Masse	mg	1.101	1.105	1.152
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	26.167	26.243	27.293
184	β_gemessen	mg/L	63.300	77.550	58.250
	Masse an N	**mg**	**16.221**	**19.873**	**14.927**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-9.946	-6.370	-12.366
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-13.926	-10.652	-15.063
	Entnahme_Masse	mg	0.696	0.853	0.641
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	17.139	20.634	15.901
238	β_gemessen	mg/L	0.920	24.840	0.340
	Masse an N	**mg**	**0.236**	**6.366**	**0.087**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-16.903	-14.269	-15.814
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-28.851	-23.251	-29.026
	Entnahme_Masse	mg	0.010	0.273	0.004
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	1.840	7.706	1.698
285	β_gemessen	mg/L	Versuch	0.600	0.000
	Masse an N	**mg**	aufgelöst	**0.154**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	(Sediment-	-7.553	-1.698
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	analyse für	-29.920	-30.525
	Entnahme_Masse	mg	AG lt. Angebot)	0.007	0.000
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.177	30.030
287	β_gemessen	mg/L		107.110	107.300
	Masse an N	**mg**		**27.448**	**27.497**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.729	-2.533
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-32.329	-32.761
	Entnahme_Masse	mg		1.178	1.180
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		27.884	27.931
301	β_gemessen	mg/L		89.660	89.230
	Masse an N	**mg**		**22.976**	**22.866**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-4.908	-5.064
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-36.663	-37.233
	Entnahme_Masse	mg		0.986	0.982
	Zugabe_Masse	mg		0.000	0.000
	Masse_nachBefüllung	mg		21.990	21.885
365	β_gemessen	mg/L		26.100	24.170
	Masse an N	**mg**		**6.688**	**6.194**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-15.302	-15.691
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-50.173	-51.088
	Entnahme_Masse	mg		0.287	0.266

	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		8.015	7.542
392	β_gemessen	mg/L		20.800	6.590
	Masse an N	**mg**		**5.330**	**1.689**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.685	-5.853
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-52.544	-56.256
	Entnahme_Masse	mg		0.229	0.072
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		6.716	3.230
420	β_gemessen	mg/L		19.780	0.500
	Masse an N	**mg**		**5.069**	**0.128**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.647	-3.102
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-53.998	-58.995
	Entnahme_Masse	mg		0.218	0.006
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		34.881	30.153
441	β_gemessen	mg/L		131.380	99.700
	Masse an N	**mg**		**33.668**	**25.549**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.214	-4.603
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-55.070	-63.060
	Entnahme_Masse	mg		1.445	1.097
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		33.837	26.067
476	β_gemessen	mg/L		129.290	82.370
	Masse an N	**mg**		**33.132**	**21.108**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.705	-4.958
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-55.692	-67.438
	Entnahme_Masse	mg		1.422	0.906
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		33.324	21.816
532	β_gemessen	mg/L		120.640	43.740
	Masse an N	**mg**		**30.915**	**11.209**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.409	-10.607
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-57.819	-76.804
	Entnahme_Masse	mg		1.327	0.481
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		31.203	12.342
570	β_gemessen	mg/L		116.200	10.620
	Masse an N	**mg**		**29.778**	**2.722**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.425	-9.620
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-59.077	-85.298

Tabelle A7-17: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W17

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W17/3**	**W17/2**	**W17/1**
	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	45.5	45.5	45.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.205	0.205	0.205
	Masse_ZugabeWasser	L	0.2	0.2	0.2
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	253.079	253.079	253.079
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.253	0.253	0.253
	c(β)_1	mg/L	146.740	146.740	146.740
	c(β)_2		146.740	146.740	146.740
	M(trocken)	g	258.921	258.921	258.921
0	Ausgangskonzentration	mg/L	120.910	120.920	121.660
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**30.600**	**30.602**	**30.790**
	Entnahme_Masse	mg	1.330	1.330	1.338
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse nach Befüllung	mg	30.884	30.886	31.065
2	β_gemessen	mg/L	119.230	119.740	119.770
	Masse an N	**mg**	**30.175**	**30.304**	**30.311**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.709	-0.583	-0.754
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.619	-0.508	-0.658
	Entnahme_Masse	mg	1.312	1.317	1.317

	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	30.477	30.601	30.608
7	β_gemessen	mg/L	110.500	109.670	110.360
	Masse an N	**mg**	**27.965**	**27.755**	**27.930**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.512	-2.846	-2.678
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.809	-2.990	-2.993
	Entnahme_Masse	mg	1.216	1.206	1.214
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	28.364	28.163	28.330
21	β_gemessen	mg/L	103.350	103.590	105.260
	Masse an N	**mg**	**26.156**	**26.216**	**26.639**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.208	-1.946	-1.691
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.735	-4.687	-4.468
	Entnahme_Masse	mg	1.137	1.139	1.158
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	26.633	26.691	27.095
84	β_gemessen	mg/L	87.310	86.580	88.460
	Masse an N	**mg**	**22.096**	**21.912**	**22.387**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-4.537	-4.780	-4.708
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-8.692	-8.856	-8.574
	Entnahme_Masse	mg	0.960	0.952	0.973
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	22.750	22.573	23.028
182	β_gemessen	mg/L	51.910	18.930	41.460
	Masse an N	**mg**	**13.137**	**4.791**	**10.493**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-9.613	-17.783	-12.536
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-17.075	-24.364	-19.506
	Entnahme_Masse	mg	0.571	0.208	0.456
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	14.180	6.197	11.651
238	β_gemessen	mg/L	10.340	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**2.617**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-11.564	-6.197	-11.651
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-27.159	-29.768	-29.667
	Entnahme_Masse	mg	0.114	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg	4.117	1.614	1.614
275	β_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.614	-1.614
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-31.176	-31.075
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.030
287	β_gemessen	mg/L		108.370	106.650
	Masse an N	**mg**		**27.426**	**26.991**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.604	-3.039
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-33.446	-33.725
	Entnahme_Masse	mg		1.192	1.173
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		27.848	27.432
301	β_gemessen	mg/L		94.790	89.490
	Masse an N	**mg**		**23.989**	**22.648**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.859	-4.784
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-36.812	-37.897
	Entnahme_Masse	mg		1.043	0.984
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		24.561	23.278
365	β_gemessen	mg/L		29.310	3.990
	Masse an N	**mg**		**7.418**	**1.010**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-17.143	-22.268
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-51.762	-57.317
	Entnahme_Masse	mg		0.322	0.044
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		8.709	2.580
392	β_gemessen	mg/L		0.240	0.670

	Masse an N	**mg**		**0.061**	**0.170**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-8.649	-2.410
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-59.305	-59.419
	Entnahme_Masse	mg		0.003	0.007
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.088	30.192
399	β_gemessen	mg/L		108.470	109.430
	Masse an N	**mg**		**27.451**	**27.694**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.637	-2.498
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-61.604	-61.598
	Entnahme_Masse	mg		1.193	1.204
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		27.872	28.105
413	β_gemessen	mg/L		92.540	89.440
	Masse an N	**mg**		**23.420**	**22.635**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-4.453	-5.469
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-65.487	-66.368
	Entnahme_Masse	mg		1.018	0.984
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		24.016	23.266
476	β_gemessen	mg/L		1.090	1.700
	Masse an N	**mg**		**0.276**	**0.430**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-23.740	-22.835
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-86.191	-86.283
	Entnahme_Masse	mg		0.012	0.019
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		1.878	2.026
490	β_gemessen	mg/L		0.000	0.240
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.061**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.878	-1.965
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-87.829	-87.996
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.003
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.088
511	β_gemessen	mg/L		88.740	94.150
	Masse an N	**mg**		**22.458**	**23.827**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.572	-6.261
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-94.433	-93.456
	Entnahme_Masse	mg		0.976	1.036
	Zugabe_Masse	mg		1.614	1.614
	Masse_nachBefüllung	mg		23.096	24.406
560	β_gemessen	mg/L		1.880	
	Masse an N	**mg**		**0.476**	
	Elimination E(t)_Masse	mg		-22.620	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-114.160	-93.456
	Entnahme_Masse	mg		0.021	
	Zugabe_Masse	mg		1.614	
	Masse_nachBefüllung	mg		2.069	
570	β_gemessen	mg/L			0.250
	Masse an N	**mg**			**0.063**
	Elimination E(t)_Masse	mg			0.063
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-114.160	-93.401

Tabelle A7-18: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W18

Tage nach Beginn			**Parallelansätze**		
	Parameter	**Einheit**	**W18/3**	**W18/2**	**W18/1**
	Bohrung		**2123**	**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	49.5	49.5	49.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.195	0.195	0.195
	Masse_ZugabeWasser	L	0.2	0.2	0.2
	Wasservolumen im Gefäß				
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	250.912	250.912	250.912
	c(β)_1	mg/L	146.740	146.740	146.740
	c(β)_2		146.740	146.740	146.740

	M(trocken)	g	261.088	261.088	261.088
0	Ausgangskonzentration	mg/L	120.470	122.200	123.600
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**30.227**	**30.661**	**31.013**
	Entnahme_Masse	mg	1.325	1.344	1.360
	Zugabe_Masse	mg	1.614	1.614	1.614
	Masse nach Befüllung	mg	30.516	30.931	31.267
2	β_gemessen	mg/L	119.650	120.290	123.140
	M()_48h_PN	**mg**	**30.022**	**30.182**	**30.897**
	E_Masse()_48h	mg	-0.495	-0.749	-0.370
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.428	-0.648	-0.320
	Entnahme_M()_48h	mg	1.316	1.323	1.355
	Zugabe_M()_48h	mg	1.614	1.614	1.614
	M()_48h_nachBefüllung	mg	30.320	30.473	31.157
7	β_gemessen_168h	mg/L	117.000	119.700	121.840
	M()_168h_PN	**mg**	**29.357**	**30.034**	**30.571**
	E_Masse()_168h	mg	-0.963	-0.439	-0.586
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.261	-1.028	-0.827
	Entnahme_M()_168h	mg	1.287	1.317	1.340
	Zugabe_M()_168h	mg	1.614	1.614	1.614
	M()_168h_nachBefüllung	mg	29.684	30.332	30.845
21	β_gemessen_504h	mg/L	119.350	119.180	118.350
	M()_504h_PN	**mg**	**29.946**	**29.904**	**29.695**
	E_Masse()_504h	mg	0.263	-0.428	-1.150
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.034	-1.398	-1.821
	Entnahme_M()_504h	mg	1.313	1.311	1.302
	Zugabe_M()_504h	mg	1.614	1.614	1.614
	M()_504h_nachBefüllung	mg	30.248	30.207	30.008
84	β_gemessen_2016h	mg/L	113.440	114.650	113.330
	M()_2016h_PN	**mg**	**28.463**	**28.767**	**28.436**
	E_Masse()_2016h	mg	-1.784	-1.440	-1.572
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.577	-2.643	-3.180
	Entnahme_M()_2016h	mg	1.248	1.261	1.247
	Zugabe_M()_2016h	mg	1.614	1.614	1.614
	M()_2016h_nachBefüllung	mg	28.830	29.120	28.803
182	β_gemessen_4368h	mg/L	86.540	87.160	86.840
	M()_4368h_PN	**mg**	**21.714**	**21.870**	**21.789**
	E_Masse()_4368h	mg	-7.116	-7.251	-7.014
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-8.731	-8.914	-9.247
	Entnahme_M()_4368h	mg	0.952	0.959	0.955
	Zugabe_M()_4368h	mg	1.614	1.614	1.614
	M()_4368h_nachBefüllung	mg	22.376	22.525	22.448
275	β_gemessen_4704h	mg/L	64.070	73.010	70.000
	M()_4704h_PN	**mg**	**16.076**	**18.319**	**17.564**
	E_Masse()_4704h	mg	-6.300	-4.206	-4.884
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-14.180	-12.551	-13.471
	Entnahme_M()_4704h	mg	0.705	0.803	0.770
	Zugabe_M()_4704h	mg	1.614	1.614	1.614
	M()_4704h_nachBefüllung	mg	16.985	19.130	18.408
301	β_gemessen_4872h	mg/L		64.690	64.440
	M()_4872h_PN	**mg**		**16.232**	**16.169**
	E_Masse()_4872h	mg		-2.899	-2.239
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-15.058	-15.407
	Entnahme_M()_4872h	mg		0.712	0.709
	Zugabe_M()_4872h	mg		1.614	1.614
	M()_4872h_nachBefüllung	mg		17.134	17.074
365	β_gemessen_5208h	mg/L		61.210	61.870
	M()_5208h_PN	**mg**		**15.358**	**15.524**
	E_Masse()_5208h	mg		-1.776	-1.550
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-16.594	-16.748
	Entnahme_M()_5208h	mg		0.673	0.681
	Zugabe_M()_5208h	mg		1.614	1.614
	M()_5208h_nachBefüllung	mg		16.299	16.458
420	β_gemessen_5208h	mg/L		54.510	55.560
	M()_5208h_PN	**mg**		**13.677**	**13.941**
	E_Masse()_5208h	mg		-2.622	-2.517
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-18.861	-18.925

	Entnahme_M()_5208h	mg		0.600	0.611
	Zugabe_M()_5208h	mg		1.614	1.614
	M()_5208h_nachBefüllung	mg		14.692	14.944
476	β_gemessen_5208h	mg/L		47.350	47.550
	M()_5208h_PN	**mg**		**11.881**	**11.931**
	E_Masse()_5208h	mg		-2.811	-3.013
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-21.293	-21.531
	Entnahme_M()_5208h	mg		0.521	0.523
	Zugabe_M()_5208h	mg		1.614	1.614
	M()_5208h_nachBefüllung	mg		12.974	13.022
532	β_gemessen_5208h	mg/L		39.510	39.980
	M()_5208h_PN	**mg**		**9.914**	**10.031**
	E_Masse()_5208h	mg		-3.060	-2.990
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-23.940	-24.117
	Entnahme_M()_5208h	mg		0.435	0.440
	Zugabe_M()_5208h	mg		1.614	1.614
	M()_5208h_nachBefüllung	mg		11.093	11.206
570	β_gemessen_5208h	mg/L		40.000	
	M()_5208h_PN	**mg**		**10.036**	
	E_Masse()_5208h	mg		-1.057	
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-24.853	

Tabelle 19: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W19

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W19/3**	**W19/2**	**W19/1**
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	21.5	21.5	21.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.45	0.45	0.45
	M(Wasser)	g	296.828	296.828	296.828
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.297	0.297	0.297
	β(T)_1	mg/L	147.500	147.500	147.500
	β(T)_2	mg/L	151.760	151.760	151.760
	β(T)_3	mg/L	156.880	156.880	156.880
	M(trocken)	g	215.172	215.172	215.172
0	Ausgangskonzentration	mg/L	113.140	121.550	122.300
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**33.583**	**36.079**	**36.302**
	Entnahme_Masse	mg	1.245	1.337	1.345
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse nach Befüllung	mg	33.961	36.365	36.579
2	β_gemessen	mg/L	117.910	118.370	118.000
	Masse an N	**mg**	**34.999**	**35.135**	**35.026**
	Elimination E(t)_Masse	mg	1.038	-1.229	-1.554
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	1.089	-1.290	-1.630
	Entnahme_Masse	mg	1.297	1.302	1.298
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	35.324	35.456	35.350
7	β_gemessen	mg/L	117.430	117.480	117.600
	Masse an N	**mg**	**34.856**	**34.871**	**34.907**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.468	-0.585	-0.443
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	0.598	-1.904	-2.095
	Entnahme_Masse	mg	1.292	1.292	1.294
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	35.187	35.202	35.236
21	β_gemessen	mg/L	81.580	81.590	81.610
	Masse an N	**mg**	**24.215**	**24.218**	**24.224**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-10.972	-10.983	-11.012
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-10.916	-13.430	-13.651
	Entnahme_Masse	mg	0.897	0.897	0.898
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	24.940	24.943	24.949
84	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.340
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.101**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-24.940	-24.943	-24.848
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-37.089	-39.606	-39.727

	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.004
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	1.623	1.623	1.720
119	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.230
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.068**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.623	-1.623	-1.651
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-38.792	-41.308	-41.460
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.003
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.096
126	β_gemessen	mg/L	100.290	86.530	98.760
	Masse an N	**mg**	**29.769**	**25.684**	**29.315**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.261	-4.346	-0.781
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-39.066	-45.869	-42.280
	Entnahme_Masse	mg	1.103	0.952	1.086
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	30.288	26.355	29.851
140	β_gemessen	mg/L	34.750	47.960	34.320
	Masse an N	**mg**	**10.315**	**14.236**	**10.187**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-19.973	-12.119	-19.664
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-60.026	-58.587	-62.916
	Entnahme_Masse	mg	0.382	0.528	0.378
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	11.555	15.331	11.432
147	β_gemessen	mg/L	30.100	41.380	27.650
	Masse an N	**mg**	**8.935**	**12.283**	**8.207**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.620	-3.048	-3.225
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-62.776	-61.786	-66.300
	Entnahme_Masse	mg	0.331	0.455	0.304
	Zugabe_Masse	mg	1.669	1.669	1.669
	Masse_nachBefüllung	mg	10.273	13.497	9.572
161	β_gemessen	mg/L	24.900	28.850	23.160
	Masse an N	**mg**	**7.391**	**8.563**	**6.875**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-22.639	-21.467	-23.221
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-86.534	-84.313	-90.669
	Entnahme_Masse	mg	0.274	0.317	0.255
	Zugabe_Masse	mg	1.669	1.669	1.669
	Masse_nachBefüllung	mg	8.786	9.915	8.289
182	β_gemessen	mg/L	11.310	3.480	8.680
	Masse an N	**mg**	**3.357**	**1.033**	**2.576**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-5.429	-8.883	-5.713
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-92.232	-93.635	-96.664
	Entnahme_Masse	mg	0.124	0.038	0.095
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	4.958	2.720	4.207
224	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-4.958	-2.720	-4.207
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-97.435	-96.489	-101.078
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
231	β_gemessen	mg/L	102.210	106.660	98.550
	Masse an N	**mg**	**30.339**	**31.660**	**29.252**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.309	1.630	-0.778
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-97.111	-94.779	-101.89
	Entnahme_Masse	mg	1.124	1.173	1.084
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	30.940	32.212	29.894
245	β_gemessen	mg/L	41.520	96.390	33.250
	Masse an N	**mg**	**12.324**	**28.611**	**9.870**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-18.616	-3.601	-20.024
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-116.64	-98.55	-122.90
	Entnahme_Masse	mg	0.457	1.060	0.366
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	13.490	29.173	11.126

294	β_gemessen	mg/L		45.700	0.580
	Masse an N	**mg**		**13.565**	**0.172**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-15.608	-10.954
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-114.938	-134.404
	Entnahme_Masse	mg		0.503	0.006
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		14.788	1.891
322	β_gemessen	mg/L		15.000	5.280
	Masse an N	**mg**		**4.452**	**1.567**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-10.336	-0.324
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-125.784	-134.744

Tabelle 20: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W20

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W20/3**	**W20/2**	**W20/1**
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	28.5	28.5	28.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.38	0.38	0.38
	M(Wasser)	g	285.913	285.913	285.913
	V(W.P)	L	0.286	0.286	0.286
	c(β)_1	mg/L	147.500	147.500	147.500
	c(β)_2	mg/L	151.760	151.760	151.760
	c(β)_3	mg/L	156.880	156.880	156.880
	M(trocken)	g	226.087	226.087	226.087
0	Ausgangskonzentration	mg/L	112.050	119.450	119.570
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**32.037**	**34.152**	**34.187**
	Entnahme_Masse	mg	1.233	1.314	1.315
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse nach Befüllung	mg	32.427	34.461	34.494
2	β_gemessen	mg/L	112.330	111.580	112.190
	Masse an N	**mg**	**32.117**	**31.902**	**32.077**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.310	-2.559	-2.417
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.310	-2.556	-2.414
	Entnahme_Masse	mg	1.236	1.227	1.234
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	32.503	32.297	32.465
7	β_gemessen	mg/L	109.080	109.280	109.390
	Masse an N	**mg**	**31.187**	**31.245**	**31.276**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.316	-1.053	-1.189
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.624	-3.607	-3.602
	Entnahme_Masse	mg	1.200	1.202	1.203
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	31.610	31.665	31.695
21	β_gemessen	mg/L	4.840	7.100	7.160
	Masse an N	**mg**	**1.384**	**2.030**	**2.047**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-30.226	-29.635	-29.648
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-31.813	-33.205	-33.213
	Entnahme_Masse	mg	0.053	0.078	0.079
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	2.953	3.574	3.591
84	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.953	-3.574	-3.591
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-34.762	-36.775	-36.799
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	1.623	1.623	1.623
119	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.230
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.066**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.623	-1.623	-1.557
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-36.383	-38.396	-38.354
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.003
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.093

126	β_gemessen	mg/L	100.290	86.530	98.760
	Masse an N	**mg**	**28.674**	**24.740**	**28.237**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.356	-5.290	-1.856
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-37.737	-43.679	-40.208
	Entnahme_Masse	mg	1.103	0.952	1.086
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	29.194	25.411	28.773
140	β_gemessen	mg/L	6.540	10.650	14.700
	Masse an N	**mg**	**1.870**	**3.045**	**4.203**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-27.324	-22.366	-24.570
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-65.026	-66.017	-64.748
	Entnahme_Masse	mg	0.072	0.117	0.162
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	3.420	4.550	5.664
147	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.420	-4.550	-5.664
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-68.443	-70.562	-70.405
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
154	β_gemessen	mg/L	15.260	21.810	25.230
	Masse an N	**mg**	**4.363**	**6.236**	**7.214**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-25.667	-23.794	-22.880
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-94.078	-94.326	-93.256
	Entnahme_Masse	mg	0.168	0.240	0.278
	Zugabe_Masse	mg	1.669	1.669	1.669
	Masse_nachBefüllung	mg	5.865	7.665	8.605
161	β_gemessen	mg/L	0.000	0.310	0.810
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.089**	**0.232**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-5.865	-7.577	-8.374
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-99.935	-101.894	-101.619
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.003	0.009
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.115	30.253
168	β_gemessen	mg/L	32.620	37.310	62.440
	Masse an N	**mg**	**9.326**	**10.667**	**17.852**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-20.704	-19.448	-12.400
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-120.613	-121.317	-114.004
	Entnahme_Masse	mg	0.359	0.410	0.687
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	10.693	11.983	18.891
182	β_gemessen	mg/L	0.220	0.800	10.000
	Masse an N	**mg**	**0.063**	**0.229**	**2.859**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-10.630	-11.754	-16.032
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-131.230	-133.057	-130.016
	Entnahme_Masse	mg	0.002	0.009	0.110
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	1.786	1.946	4.475
224	β_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.786	-1.946	-4.475
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-133.014	-135.000	-134.486
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
231	β_gemessen	mg/L	52.530	61.850	70.720
	Masse an N	**mg**	**15.019**	**17.684**	**20.220**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-15.011	-12.346	-9.810
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-148.006	-147.331	-144.284
	Entnahme_Masse	mg	0.578	0.680	0.778
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	16.167	18.729	21.168
245	β_gemessen	mg/L	10.870	17.280	33.150
	Masse an N	**mg**	**3.108**	**4.941**	**9.478**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-13.059	-13.788	-11.690

	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-161.049	-161.102	-155.959
	Entnahme_Masse	mg	0.120	0.190	0.365
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	4.714	6.476	10.839
273	β_gemessen	mg/L		0.000	0.620
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.177**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-6.476	-10.662
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-167.570	-166.607
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.007
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.030	30.200
280	β_gemessen	mg/L		91.580	99.360
	Masse an N	**mg**		**26.184**	**28.408**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-3.846	-1.792
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-171.412	-168.397
	Entnahme_Masse	mg		1.007	1.093
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		26.902	29.041
294	β_gemessen	mg/L		62.860	72.970
	Masse an N	**mg**		**17.972**	**20.863**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-8.930	-8.178
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-180.330	-176.565
	Entnahme_Masse	mg		0.691	0.803
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		19.007	21.786
322	β_gemessen	mg/L		18.810	37.550
	Masse an N	**mg**		**5.378**	**10.736**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-13.629	-11.050
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-193.942	-187.601
	Entnahme_Masse	mg		0.207	0.413
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		6.897	12.049
350	β_gemessen	mg/L		1.380	10.010
	Masse an N	**mg**		**0.395**	**2.862**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-6.502	-9.187
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-200.436	-196.777
	Entnahme_Masse	mg		0.015	0.110
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		2.105	4.478
357	β_gemessen	mg/L		1.330	7.520
	Masse an N	**mg**		**0.380**	**2.150**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.725	-2.327
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-202.159	-199.101
	Entnahme_Masse	mg		0.015	0.083
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		30.396	32.097
364	β_gemessen	mg/L		111.470	117.710
	Masse an N	**mg**		**31.871**	**33.655**
	Elimination E(t)_Masse	mg		1.475	1.557
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-200.686	-197.546
	Entnahme_Masse	mg		1.226	1.295
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		32.370	34.086
378	β_gemessen	mg/L		98.560	101.560
	Masse an N	**mg**		**28.180**	**29.037**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-4.191	-5.048
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-204.871	-202.588
	Entnahme_Masse	mg		1.084	1.117
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		28.821	29.646
413	β_gemessen	mg/L		65.160	30.060
	Masse an N	**mg**		**18.630**	**8.595**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-10.191	-21.051
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-215.049	-223.613
	Entnahme_Masse	mg		0.717	0.331
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726

	Masse_nachBefüllung	mg		19.639	9.990
441	β_gemessen	mg/L		43.450	3.960
	Masse an N	**mg**		**12.423**	**1.132**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-7.216	-8.857
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-222.257	-232.459
	Entnahme_Masse	mg		0.478	0.044
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		13.671	2.814
448	β_gemessen	mg/L		40.460	4.070
	Masse an N	**mg**		**11.568**	**1.164**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.103	-1.651
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-224.357	-234.108
	Entnahme_Masse	mg		0.445	0.045
	Zugabe_Masse	mg		30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg		41.153	31.149
469	β_gemessen	mg/L		141.090	100.480
	Masse an N	**mg**		**40.339**	**28.729**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.814	-2.420
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-225.169	-236.525
	Entnahme_Masse	mg		1.552	1.105
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		40.513	29.349
504	β_gemessen	mg/L		91.240	44.300
	Masse an N	**mg**		**26.087**	**12.666**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-14.426	-16.683
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-239.578	-253.188
	Entnahme_Masse	mg		1.004	0.487
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		26.809	13.904
539	β_gemessen	mg/L		71.210	10.360
	Masse an N	**mg**		**20.360**	**2.962**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-6.449	-10.942
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-246.018	-264.116
	Entnahme_Masse	mg		0.783	0.114
	Zugabe_Masse	mg		30.030	1.700
	Masse_nachBefüllung	mg		49.607	4.548
570	β_gemessen	mg/L		47.490	101.410
	Masse an N	**mg**		**13.578**	**28.994**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-36.029	24.446
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-282.002	-239.700

Tabelle A7-21: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W21

Tage nach Beginn	Parameter	Einheit	Parallelansätze W21/3	W21/2	W21/1
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	31.5	31.5	31.5
	Masse(nass)	g	312	312	312
	WG_Mittel	--	0.435	0.435	0.435
	M(Wasser)	g	294.578	294.578	294.578
	V(W.P)	L	0.295	0.295	0.295
	c(T)_1	mg/L	147.500	147.500	147.500
	c(T)_2	mg/L	151.760	151.760	151.760
	c(T)_3	mg/L	156.880	156.880	156.880
	M(trocken)	g	217.422	217.422	217.422
0	Ausgangskonzentration	mg/L	118.520	118.560	117.220
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**34.913**	**34.925**	**34.530**
	Entnahme_Masse	mg	1.304	1.304	1.289
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse nach Befüllung	mg	35.232	35.244	34.864
2	c_gemessen	mg/L	117.620	116.990	117.230
	Masse an N	**mg**	**34.648**	**34.463**	**34.533**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.584	-0.781	-0.330
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.606	-0.811	-0.343
	Entnahme_Masse	mg	1.294	1.287	1.290
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	34.977	34.798	34.866
7	c_gemessen	mg/L	112.600	112.200	115.090
	Masse an N	**mg**	**33.170**	**33.052**	**33.903**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.807	-1.747	-0.963
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.484	-2.625	-1.343
	Entnahme_Masse	mg	1.239	1.234	1.266
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	33.553	33.440	34.260
21	c_gemessen	mg/L	2.480	0.540	0.540
	Masse an N	**mg**	**0.731**	**0.159**	**0.159**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-32.823	-33.281	-34.100
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-36.572	-37.189	-36.759
	Entnahme_Masse	mg	0.027	0.006	0.006
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	2.326	1.776	1.776
84	c_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.326	-1.776	-1.776
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-38.988	-39.033	-38.603
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	1.623	1.623	1.623
119	c_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.230
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.068**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.623	-1.623	-1.555
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-40.673	-40.719	-40.218
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.003
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.095
126	c_gemessen	mg/L	8.320	2.360	5.310
	Masse an N	**mg**	**2.451**	**0.695**	**1.564**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-27.579	-29.335	-28.531
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-69.316	-71.185	-69.849
	Entnahme_Masse	mg	0.092	0.026	0.058
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623
	Masse_nachBefüllung	mg	3.982	2.292	3.128
140	c_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.982	-2.292	-3.128
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-73.451	-73.565	-73.098
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	1.623	1.623	1.623

	Masse_nachBefüllung	mg	1.623	1.623	1.623
147	c_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.623	-1.623	-1.623
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-75.136	-75.250	-74.783
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
154	c_gemessen	mg/L	20.200	6.410	20.260
	Masse an N	**mg**	**5.950**	**1.888**	**5.968**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-24.080	-28.142	-24.127
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-100.144	-104.477	-99.841
	Entnahme_Masse	mg	0.222	0.071	0.223
	Zugabe_Masse	mg	1.669	1.669	1.669
	Masse_nachBefüllung	mg	7.398	3.487	7.415
161	c_gemessen	mg/L	0.000	0.310	0.350
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.091**	**0.103**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-7.398	-3.396	-7.312
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-107.827	-108.004	-107.434
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.003	0.004
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.118	30.129
168	c_gemessen	mg/L	68.220	29.700	67.590
	Masse an N	**mg**	**20.096**	**8.749**	**19.911**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-9.934	-21.369	-10.219
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-118.144	-130.197	-118.047
	Entnahme_Masse	mg	0.750	0.327	0.743
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	21.071	10.148	20.893
182	c_gemessen	mg/L	12.000	0.000	13.000
	Masse an N	**mg**	**3.535**	**0.000**	**3.830**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-17.536	-10.148	-17.063
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-136.357	-140.736	-135.768
	Entnahme_Masse	mg	0.132	0.000	0.143
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	5.129	1.726	5.412
224	c_gemessen	mg/L	0.000	0.000	0.000
	Masse an N	**mg**	**0.000**	**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-5.129	-1.726	-5.412
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-141.683	-142.528	-141.389
	Entnahme_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg	30.030	30.030	30.030
	Masse_nachBefüllung	mg	30.030	30.030	30.030
231	c_gemessen	mg/L	84.740	57.710	84.280
	Masse an N	**mg**	**24.963**	**17.000**	**24.827**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-5.067	-13.030	-5.203
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-146.946	-156.061	-146.793
	Entnahme_Masse	mg	0.932	0.635	0.927
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	25.756	18.091	25.626
245	c_gemessen	mg/L	54.530	16.550	54.450
	Masse an N	**mg**	**16.063**	**4.875**	**16.040**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-9.693	-13.216	-9.586
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-157.013	-169.786	-156.748
	Entnahme_Masse	mg	0.600	0.182	0.599
	Zugabe_Masse	mg	1.726	1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg	17.189	6.419	17.167
294	c_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.000**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-6.419	-17.167
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-176.452	-174.577
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		1.726	1.726
322	c_gemessen	mg/L		0.000	0.000
	Masse an N	**mg**		**0.000**	**0.000**

	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.726	-1.726
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-178.245	-176.369
	Entnahme_Masse	mg		0.000	0.000
	Zugabe_Masse	mg		60.060	60.060
	Masse_nachBefüllung	mg		60.060	60.060
329	c_gemessen	mg/L		210.340	223.500
	Masse an N	**mg**		**61.962**	**65.838**
	Elimination E(t)_Masse	mg		1.902	5.778
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-176.270	-170.368
	Entnahme_Masse	mg		2.314	2.459
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		61.374	65.105
365	c_gemessen	mg/L		168.770	182.590
	Masse an N	**mg**		**49.716**	**53.787**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-11.658	-11.318
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-188.377	-182.123
	Entnahme_Masse	mg		1.856	2.008
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		49.585	53.504
392	c_gemessen	mg/L		95.640	79.560
	Masse an N	**mg**		**28.173**	**23.437**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-21.412	-30.068
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-210.614	-213.350
	Entnahme_Masse	mg		1.052	0.875
	Zugabe_Masse	mg		1.726	1.726
	Masse_nachBefüllung	mg		28.847	24.287
434	c_gemessen	mg/L			15.870
	Masse an N	**mg**			**4.675**
	Elimination E(t)_Masse	mg			-19.612
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N			-233.718
	Entnahme_Masse	mg			0.175
	Zugabe_Masse	mg			1.726
	Masse_nachBefüllung	mg			6.226
469	c_gemessen	mg/L			10.430
	Masse an N	**mg**			**3.072**
	Elimination E(t)_Masse	mg			-3.154
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N			-236.994
	Entnahme_Masse	mg			0.115
	Zugabe_Masse	mg			1.726
	Masse_nachBefüllung	mg			4.683
483	c_gemessen	mg/L			5.940
	Masse an N	**mg**			**1.750**
	Elimination E(t)_Masse	mg			-2.934
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N			-240.040
	Entnahme_Masse	mg			0.065
	Zugabe_Masse	mg			30.030
	Masse_nachBefüllung	mg			31.714
504	c_gemessen	mg/L			114.320
	Masse an N	**mg**			**33.676**
	Elimination E(t)_Masse	mg			1.962
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N			-238.003
	Entnahme_Masse	mg			1.258
	Zugabe_Masse	mg			1.726
	Masse_nachBefüllung	mg			34.144
539	c_gemessen	mg/L			49.240
	Masse an N	**mg**			**14.505**
	Elimination E(t)_Masse	mg			-19.639
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N			-258.400
	Entnahme_Masse	mg			0.542
	Zugabe_Masse	mg			1.726
	Masse_nachBefüllung	mg			15.689
570	c_gemessen	mg/L			19.870
	Masse an N	**mg**			**5.853**
	Elimination E(t)_Masse	mg			-9.836
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N			-268.615

Tabelle A7-22: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W22

Tage nach Beginn	Parameter	Einheit	Parallelansätze W22/3	W22/2	W22/1
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	25.5	25.5	25.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.215	0.215	0.215
	Masse Porenwasser	g	55.21	55.21	55.21
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	255.210	255.210	255.210
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.255	0.255	0.255
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	150.260	150.260	150.260
	M(trocken)	g	256.790	256.790	256.790
0	Ausgangskonzentration	mg/L	127.000	128.520	128.610
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**32.412**	**32.800**	**32.823**
	Entnahme_Masse	mg	1.397	1.414	1.415
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse nach Befüllung	mg	32.668	33.039	33.061
2	c_gemessen	mg/L	126.780	127.450	127.850
	Masse an N	**mg**	**32.356**	**32.526**	**32.629**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.312	-0.512	-0.432
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.274	-0.450	-0.380
	Entnahme_Masse	mg	1.395	1.402	1.406
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	32.614	32.777	32.875
7	c_gemessen	mg/L	127.690	128.710	128.960
	Masse an N	**mg**	**32.588**	**32.848**	**32.912**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.026	0.071	0.037
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.297	-0.388	-0.348
	Entnahme_Masse	mg	1.405	1.416	1.419
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	32.836	33.085	33.146
21	c_gemessen	mg/L	128.540	128.540	130.070
	Masse an N	**mg**	**32.805**	**32.805**	**33.195**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.031	-0.280	0.049
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.325	-0.635	-0.305
	Entnahme_Masse	mg	1.414	1.414	1.431
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	33.044	33.044	33.417
84	c_gemessen	mg/L	128.810	129.440	128.000
	Masse an N	**mg**	**32.874**	**33.034**	**32.667**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.170	-0.009	-0.750
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.474	-0.643	-0.964
	Entnahme_Masse	mg	1.417	1.424	1.408
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	33.110	33.263	32.912
182	c_gemessen	mg/L	128.530	128.470	126.600
	Masse an N	**mg**	**32.802**	**32.787**	**32.310**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.307	-0.477	-0.602
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.745	-1.062	-1.494
	Entnahme_Masse	mg	1.414	1.413	1.393
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	33.041	33.027	32.570
238	c_gemessen	mg/L	120.320	123.690	124.550
	Masse an N	**mg**	**30.707**	**31.567**	**31.786**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.334	-1.460	-0.783
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.797	-2.346	-2.183
	Entnahme_Masse	mg	1.324	1.361	1.370
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	31.036	31.859	32.069
287	c_gemessen	mg/L		119.370	118.110
	Masse an N	**mg**		**30.464**	**30.143**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.395	-1.926
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-3.572	-3.877
	Entnahme_Masse	mg		1.313	1.299
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653

	Masse_nachBefüllung	mg		30.804	30.496
365	c_gemessen	mg/L		122.080	121.650
	Masse an N	**mg**		**31.156**	**31.046**
	Elimination E(t)_Masse	mg		0.352	0.550
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-3.263	-3.393
	Entnahme_Masse	mg		1.343	1.338
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		31.466	31.361
406	c_gemessen	mg/L		124.790	122.520
	Masse an N	**mg**		**31.848**	**31.268**
	Elimination E(t)_Masse	mg		0.382	-0.093
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-2.927	-3.475
	Entnahme_Masse	mg		1.373	1.348
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		32.128	31.573
462	c_gemessen	mg/L		124.340	123.200
	Masse an N	**mg**		**31.733**	**31.442**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.395	-0.132
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-3.274	-3.591
	Entnahme_Masse	mg		1.368	1.355
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		32.018	31.740
525	c_gemessen	mg/L		125.210	123.580
	Masse an N	**mg**		**31.955**	**31.539**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.063	-0.201
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-3.330	-3.767
	Entnahme_Masse	mg		1.377	1.359
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		32.230	31.832
570	c_gemessen	mg/L		125.340	124.460
	Masse an N	**mg**		**31.988**	**31.763**
	Elimination E(t)_Masse	mg		0.522	0.402
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-2.871	-3.413

Tabelle A7-23: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W23

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**W23/3**	**W23/2**	**W23/1**
	Bohrung		**2113**	**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	34.5	34.5	34.5
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.135	0.135	0.135
	Masse Porenwasser	g	37.11	37.11	37.11
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Wasservolumen im Gefäß	g	237.110	237.110	237.110
	Konzentration der Testlösg.	L	0.237	0.237	0.237
	M(trocken)	mg/L	150.260	150.260	150.260
	M(trocken)	g	274.890	274.890	274.890
0	Ausgangskonzentration	mg/L	139.050	141.570	141.110
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**32.970**	**33.568**	**33.459**
	Entnahme_Masse	mg	1.530	1.557	1.552
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse nach Befüllung	mg	33.093	33.663	33.559
2	c_gemessen	mg/L	138.590	139.060	139.170
	Masse an N	**mg**	**32.861**	**32.973**	**32.999**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.232	-0.691	-0.561
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.191	-0.567	-0.461
	Entnahme_Masse	mg	1.524	1.530	1.531
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	32.989	33.096	33.121
7	c_gemessen	mg/L	136.700	137.550	136.040
	Masse an N	**mg**	**32.413**	**32.614**	**32.256**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.577	-0.481	-0.864
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.664	-0.963	-1.170
	Entnahme_Masse	mg	1.504	1.513	1.496
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653

	Masse_nachBefüllung	mg	32.562	32.754	32.413
21	c_gemessen	mg/L	119.460	118.440	114.350
	Masse an N	**mg**	**28.325**	**28.083**	**27.114**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-4.237	-4.671	-5.299
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.145	-4.800	-5.523
	Entnahme_Masse	mg	1.314	1.303	1.258
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	28.664	28.433	27.509
84	c_gemessen	mg/L	68.280	68.910	65.860
	Masse an N	**mg**	**16.190**	**16.339**	**15.616**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-12.474	-12.094	-11.892
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-14.392	-14.734	-15.292
	Entnahme_Masse	mg	0.751	0.758	0.724
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	17.092	17.234	16.544
112	c_gemessen	mg/L	67.680	68.690	66.130
	Masse an N	**mg**	**16.048**	**16.287**	**15.680**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.044	-0.947	-0.864
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-15.249	-15.512	-16.003
	Entnahme_Masse	mg	0.744	0.756	0.727
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	16.956	17.184	16.606
182	c_gemessen	mg/L	89.390	93.670	99.610
	Masse an N	**mg**	**21.195**	**22.210**	**23.619**
	Elimination E(t)_Masse	mg	4.239	5.026	7.013
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-11.767	-11.384	-10.242
	Entnahme_Masse	mg	0.983	1.030	1.096
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	21.865	22.833	24.176
224	c_gemessen	mg/L	87.840	88.730	89.420
	Masse an N	**mg**	**20.828**	**21.039**	**21.202**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.037	-1.794	-2.973
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-12.619	-12.857	-12.684
	Entnahme_Masse	mg	0.966	0.976	0.984
	Zugabe_Masse	mg	1.653	1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg	21.514	21.716	21.872
275	c_gemessen	mg/L		91.100	93.120
	Masse an N	**mg**		**21.601**	**22.080**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.115	0.208
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-12.952	-12.513
	Entnahme_Masse	mg		1.002	1.024
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		22.251	22.708
365	c_gemessen	mg/L		95.690	95.950
	Masse an N	**mg**		**22.689**	**22.751**
	Elimination E(t)_Masse	mg		5.505	6.145
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-8.430	-7.465
	Entnahme_Masse	mg		1.053	1.055
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		23.289	23.348
406	c_gemessen	mg/L		94.280	94.260
	Masse an N	**mg**		**22.355**	**22.350**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.478	-1.826
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-8.822	-8.965
	Entnahme_Masse	mg		1.037	1.037
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		22.971	22.966
462	c_gemessen	mg/L		95.380	95.140
	Masse an N	**mg**		**22.616**	**22.559**
	Elimination E(t)_Masse	mg		0.900	0.687
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-8.083	-8.401
	Entnahme_Masse	mg		1.049	1.047
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		23.219	23.165
525	c_gemessen	mg/L		94.380	94.480
	Masse an N	**mg**		**22.378**	**22.402**

	Elimination E(t)_Masse	mg		0.127	-0.306
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-7.979	-8.652
	Entnahme_Masse	mg		1.038	1.039
	Zugabe_Masse	mg		1.653	1.653
	Masse_nachBefüllung	mg		22.993	23.016
570	c_gemessen	mg/L		96.440	96.240
	Masse an N	**mg**		**22.867**	**22.819**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-0.422	-0.529
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-8.326	-9.086

Tabelle A7-24: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W120

Stunden	**Parameter**	**Einheit**	**W120/1**	**W120/2**
	Bohrung		**2122**	**2122**
	Teufe	m_GOK	33 -35	33 - 35
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312
	Wassergehalt	--	0.18	0.18
	Masse Porenwasser	g	38.3	38.3
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	247.593	247.593
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.248	0.248
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	151.410	151.410
	M(trocken)	g	264.407	264.407
0	Ausgangskonzentration	mg/L	122.305	122.305
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**30.282**	**30.282**
	Entnahme_Masse	mg	1.345	1.345
	Zugabe_Masse	mg	1.666	1.666
	Masse nach Befüllung	mg	30.602	30.602
24	c_gemessen	mg/L	116.640	116.350
	Masse an N	**mg**	**28.879**	**28.807**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.723	-1.795
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.471	-1.533
	Entnahme_Masse	mg	1.283	1.280
	Zugabe_Masse	mg	1.666	1.666
	Masse_nachBefüllung	mg	29.262	29.193
36	c_gemessen	mg/L	116.470	116.600
	Masse an N	**mg**	**28.837**	**28.869**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.425	-0.324
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.834	-1.809
	Entnahme_Masse	mg	1.281	1.283
	Zugabe_Masse	mg	1.666	1.666
	Masse_nachBefüllung	mg	29.222	29.252
48	c_gemessen	mg/L	116.530	116.610
	Masse an N	**mg**	**28.852**	**28.872**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.369	-0.380
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.149	-2.134
	Entnahme_Masse	mg	1.282	1.283
	Zugabe_Masse	mg	1.666	1.666
	Masse_nachBefüllung	mg	29.236	29.255
60	c_gemessen	mg/L	116.370	116.340
	Masse an N	**mg**	**28.812**	**28.805**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.423	-0.450
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.511	-2.518
	Entnahme_Masse	mg	1.280	1.280
	Zugabe_Masse	mg	1.666	1.666
	Masse_nachBefüllung	mg	29.198	29.191
72	c_gemessen	mg/L	118.160	118.290
	Masse an N	**mg**	**29.256**	**29.288**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.058	0.097
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.462	-2.435

Tabelle A7-25: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch W340

Stunden nach			**Parallelansätze**	
	Parameter	**Einheit**		

	Bohrung		**2123**	**2123**
	Teufe	m_GOK	42 - 44	42 - 44
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312
	Wassergehalt	--	0.25	0.25
	Masse Porenwasser	g	38.3	38.3
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	262.400	262.400
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.262	0.262
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	178.000	178.000
	M(trocken)	g	249.600	249.600
0	Ausgangskonzentration	mg/L	135.671	135.671
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**35.600**	**35.600**
	Entnahme_Masse	mg	1.492	1.492
	Zugabe_Masse	mg	1.958	1.958
	Masse nach Befüllung	mg	36.066	36.066
24	c_gemessen	mg/L	134.080	135.360
	Masse an N	**mg**	**35.183**	**35.518**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.883	-0.547
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.799	-0.495
	Entnahme_Masse	mg	1.475	1.489
	Zugabe_Masse	mg	1.958	1.958
	Masse_nachBefüllung	mg	35.666	35.988
36	c_gemessen	mg/L	132.040	132.010
	Masse an N	**mg**	**34.647**	**34.639**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.018	-1.348
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.720	-1.715
	Entnahme_Masse	mg	1.452	1.452
	Zugabe_Masse	mg	1.958	1.958
	Masse_nachBefüllung	mg	35.153	35.145
48	c_gemessen	mg/L	132.620	132.200
	Masse an N	**mg**	**34.799**	**34.689**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.353	-0.456
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.040	-2.127
	Entnahme_Masse	mg	1.459	1.454
	Zugabe_Masse	mg	1.958	1.958
	Masse_nachBefüllung	mg	35.299	35.193
60	c_gemessen	mg/L	131.500	131.510
	Masse an N	**mg**	**34.506**	**34.508**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.793	-0.685
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.757	-2.747
	Entnahme_Masse	mg	1.447	1.447
	Zugabe_Masse	mg	1.958	1.958
	Masse_nachBefüllung	mg	35.017	35.020
72	c_gemessen	mg/L	131.130	131.520
	Masse an N	**mg**	**34.409**	**34.511**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.609	-0.509
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.308	-3.207

Tabelle A7-26: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination Batchversuch W780

Stunden nach Beginn			**Parallelansätze**	
	Parameter	**Einheit**	**780/2**	**780/1**
	Bohrung		**2113**	**2113**
	Teufe	m_GOK	41 - 43	41 - 43
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312
	Wassergehalt	--	0.18	0.18
	Masse Porenwasser	g	38.3	38.3
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	247.593	247.593
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.248	0.248
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	150.000	150.000
	M(trocken)	g	264.407	264.407
0	Ausgangskonzentration	mg/L	114.200	114.200
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**28.275**	**28.275**
	Entnahme_Masse	mg	1.256	1.256

	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650
	Masse nach Befüllung	mg	28.669	28.669
24	c_gemessen	mg/L	112.220	114.350
	Masse an N	**mg**	**27.785**	**28.312**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.884	-0.357
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.755	-0.305
	Entnahme_Masse	mg	1.234	1.258
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	28.200	28.704
36	c_gemessen	mg/L	112.380	113.410
	Masse an N	**mg**	**27.825**	**28.080**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.376	-0.625
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.076	-0.838
	Entnahme_Masse	mg	1.236	1.248
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	28.238	28.482
48	c_gemessen	mg/L	115.440	115.020
	Masse an N	**mg**	**28.582**	**28.478**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.344	-0.004
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.782	-0.842
	Entnahme_Masse	mg	1.270	1.265
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	28.962	28.863
60	c_gemessen	mg/L	115.230	115.070
	Masse an N	**mg**	**28.530**	**28.491**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.432	-0.372
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.151	-1.160
	Entnahme_Masse	mg	1.268	1.266
	Zugabe_Masse	mg	1.650	1.650
	Masse_nachBefüllung	mg	28.913	28.875
72	c_gemessen	mg/L	117.520	117.410
	Masse an N	**mg**	**29.097**	**29.070**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.185	0.195
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.994	-0.993

Tabelle A7-27: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch S1

Tage nach Versuchsbeginn			Paralellansätze		
	Parameter	**Einheit**	**S1/1**	**S1/2**	**S1/3**
	Bohrung		**123**	**123**	**123**
	Teufe	m_GOK	17	17	17
	Sediment-Masse(nass)	g	312		312
	Wassergehalt	--	0.21	0.21	0.21
	Masse Porenwasser	g	54.15	54.15	54.15
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	254.149	254.149	254.149
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.254	0.254	0.254
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	155.360	155.360	155.360
	M(trocken)	g	257.851	257.851	257.851
0	Ausgangskonzentration	mg/L	160.930	159.790	160.340
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**40.900**	**40.610**	**40.750**
	Entnahme_Masse	mg	1.770	1.758	1.764
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709	1.709
	Masse nach Befüllung	mg	40.839	40.562	40.695
2	β_gemessen	mg/L	160.560	160.020	158.750
	Masse an N	**mg**	**40.806**	**40.669**	**40.346**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.033	0.107	-0.349
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.029	0.094	-0.306
	Entnahme_Masse	mg	1.766	1.760	1.746
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	40.749	40.618	40.309
7	β_gemessen	mg/L	160.240	159.680	156.430
	Masse an N	**mg**	**40.725**	**40.582**	**39.756**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.024	-0.035	-0.552
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.050	0.063	-0.790
	Entnahme_Masse	mg	1.763	1.756	1.721
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	40.671	40.535	39.745
21	β_gemessen	mg/L	159.420	157.240	158.340
	Masse an N	**mg**	**40.516**	**39.962**	**40.242**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.155	-0.573	0.497
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.185	-0.438	-0.354
	Entnahme_Masse	mg	1.754	1.730	1.742
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	40.472	39.942	40.209
84	β_gemessen	mg/L	157.650	158.340	156.580
	Masse an N	**mg**	**40.067**	**40.242**	**39.795**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.405	0.300	-0.415
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.540	-0.175	-0.717
	Entnahme_Masse	mg	1.734	1.742	1.722
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	40.041	40.209	39.781
184	β_gemessen	mg/L	158.260	158.600	158.450
	Masse an N	**mg**	**40.222**	**40.308**	**40.270**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.180	0.099	0.489
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.382	-0.089	-0.289
	Entnahme_Masse	mg	1.741	1.745	1.743
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	40.190	40.272	40.236
275	β_gemessen	mg/L	148.320	148.490	148.440
	Masse an N	**mg**	**37.695**	**37.739**	**37.726**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.494	-2.534	-2.510
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.567	-2.308	-2.487
	Entnahme_Masse	mg	1.632	1.633	1.633
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	37.773	37.814	37.802
365	β_gemessen	mg/L		140.220	143.020
	Masse an N	**mg**		**35.637**	**36.348**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-2.177	-1.454
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-4.215	-3.760

Tabelle A7-28: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch S2

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**S2/3**	**S2/2**	**S2/1**
	Bohrung		**117/123**	**117/123**	**117/123**
	Teufe	m_GOK	34	34	34
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.19	0.19	0.19
	Masse Porenwasser	g	49.82	49.82	49.82
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	249.815	249.815	249.815
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.250	0.250	0.250
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	159.560	159.560	159.560
	M(trocken)	g	262.185	262.185	262.185
0	Ausgangskonzentration	mg/L	136.600	140.360	136.580
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**34.125**	**35.064**	**34.120**
	Entnahme_Masse	mg	1.503	1.544	1.502
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse nach Befüllung	mg	34.377	35.275	34.373
2	β_gemessen	mg/L	132.130	132.920	132.360
	Masse an N	**mg**	**33.008**	**33.205**	**33.066**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.369	-2.070	-1.307
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-1.179	-1.783	-1.126
	Entnahme_Masse	mg	1.453	1.462	1.456
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	33.310	33.498	33.365
7	β_gemessen	mg/L	127.200	126.020	127.940
	Masse an N	**mg**	**31.776**	**31.482**	**31.961**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.533	-2.017	-1.403
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.500	-3.520	-2.334
	Entnahme_Masse	mg	1.399	1.386	1.407
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	32.132	31.851	32.309
21	β_gemessen	mg/L	127.550	127.650	126.710
	Masse an N	**mg**	**31.864**	**31.889**	**31.654**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.269	0.038	-0.655
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.731	-3.487	-2.899
	Entnahme_Masse	mg	1.403	1.404	1.394
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	32.216	32.240	32.015
84	β_gemessen	mg/L	124.510	126.900	123.950
	Masse an N	**mg**	**31.104**	**31.702**	**30.965**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.112	-0.538	-1.051
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.688	-3.950	-3.804
	Entnahme_Masse	mg	1.370	1.396	1.363
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	31.490	32.061	31.356
184	β_gemessen	mg/L	123.410	124.420	120.390
	Masse an N	**mg**	**30.830**	**31.082**	**30.075**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.660	-0.979	-1.281
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.257	-4.793	-4.907
	Entnahme_Masse	mg	1.358	1.369	1.324
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	31.227	31.469	30.506
275	β_gemessen	mg/L	106.780	106.276	106.460
	Masse an N	**mg**	**26.675**	**26.549**	**26.595**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-4.552	-4.919	-3.911
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-8.178	-9.030	-8.275
	Entnahme_Masse	mg	1.175	1.169	1.171
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	27.256	27.135	27.179
365	β_gemessen	mg/L		101.500	100.560
	Masse an N	**mg**		**25.356**	**25.121**
	Elimination E(t)_Masse	mg		-1.779	-2.058
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N		-10.562	-10.047

Tabelle A7-29: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch S3

Tage nach Beginn			Parallelansätze		
	Parameter	**Einheit**	**S3/3**	**S3/2**	**S3/1**
	Bohrung		**118/128**	**118/128**	**118/128**
	Teufe	m_GOK	18	18	18
	Sediment-Masse(nass)	g	312	312	312
	Wassergehalt	--	0.21	0.21	0.21
	Masse Porenwasser	g	54.15	54.15	54.15
	Masse_ZugabeWasser	g	200	200	200
	Masse(Wasser) im Gefäß	g	254.149	254.149	254.149
	Wasservolumen im Gefäß	L	0.254	0.254	0.254
	Konzentration der Testlösg.	mg/L	159.560	159.560	159.560
	M(trocken)	g	257.851	257.851	257.851
0	Ausgangskonzentration	mg/L	167.91	168.890	167.330
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**42.674**	**42.923**	**42.527**
	Entnahme_Masse	mg	1.847	1.858	1.841
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse nach Befüllung	mg	42.582	42.821	42.441
2	β_gemessen	mg/L	153.500	154.010	155.280
	Masse an N	**mg**	**39.012**	**39.141**	**39.464**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-3.570	-3.679	-2.977
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.127	-3.222	-2.607
	Entnahme_Masse	mg	1.689	1.694	1.708
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	39.078	39.203	39.511
7	β_gemessen	mg/L	149.220	150.000	151.360
	Masse an N	**mg**	**37.924**	**38.122**	**38.468**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-1.154	-1.080	-1.043
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.138	-4.168	-3.521
	Entnahme_Masse	mg	1.641	1.650	1.665
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	38.038	38.227	38.558
21	β_gemessen	mg/L	149.170	150.730	150.490
	Masse an N	**mg**	**37.911**	**38.308**	**38.247**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.126	0.080	-0.311
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.248	-4.097	-3.793
	Entnahme_Masse	mg	1.641	1.658	1.655
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	38.026	38.405	38.347
84	β_gemessen	mg/L	151.640	152.250	152.680
	Masse an N	**mg**	**38.539**	**38.694**	**38.803**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.513	0.289	0.457
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.799	-3.844	-3.393
	Entnahme_Masse	mg	1.668	1.675	1.679
	Zugabe_Masse	mg	1.755	1.755	1.755
	Masse_nachBefüllung	mg	38.626	38.775	38.879
184	β_gemessen	mg/L	152.410	155.450	153.240
	Masse an N	**mg**	**38.735**	**39.507**	**38.946**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.109	0.733	0.067
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-3.704	-3.202	-3.335
	Entnahme_Masse	mg	1.677	1.710	1.686
	Zugabe_Masse	mg	0.000	0.000	0.000
	Masse_nachBefüllung	mg	37.058	37.797	37.260
275	β_gemessen	mg/L	144.160	140.230	144.890
	Masse an N	**mg**	**36.638**	**35.639**	**36.824**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.420	-2.158	-0.437
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.072	-5.092	-3.717

Tabelle A7-30: Messwerte und berechnete Werte der Nitratelimination für Batchversuch S4

Tage nach Beginn			Parallelansätze	
	Parameter	**Einheit**	**S4/2**	**S4/1**
	Bohrung		**128**	**128**
	Teufe	m_GOK	31	31
	Masse(nass)	g	312	312
	WG_Mittel	--	0.19	0.19
	M(Wasser)	g	249.815	249.815
	V(W.P)	L	0.250	0.250

	β(T)_1	mg/L	155.360	155.360
	M(trocken)	g	262.185	262.185
0	Ausgangskonzentration	mg/L	132.380	141.620
	Masse an N im Gefäß	**mg**	**33.071**	**35.379**
	Entnahme_Masse	mg	1.456	1.558
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse nach Befüllung	mg	33.323	35.530
1,5	β_gemessen	mg/L	130.920	131.710
	Masse an N	**mg**	**32.706**	**32.903**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.618	-2.627
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.532	-2.262
	Entnahme_Masse	mg	1.440	1.449
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	32.975	33.163
2	β_gemessen	mg/L	134.090	134.070
	Masse an N	**mg**	**33.498**	**33.493**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.523	0.329
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.081	-1.979
	Entnahme_Masse	mg	1.475	1.475
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	33.732	33.727
2,5	β_gemessen	mg/L	134.480	132.050
	Masse an N	**mg**	**33.595**	**32.988**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.137	-0.739
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.199	-2.615
	Entnahme_Masse	mg	1.479	1.453
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	33.825	33.244
3	β_gemessen	mg/L	132.800	133.490
	Masse an N	**mg**	**33.175**	**33.348**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.649	0.103
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.758	-2.526
	Entnahme_Masse	mg	1.461	1.468
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	33.424	33.588
7	β_gemessen	mg/L	135.150	134.170
	Masse an N	**mg**	**33.763**	**33.518**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.339	-0.071
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.466	-2.587
	Entnahme_Masse	mg	1.487	1.476
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	33.985	33.751
21	β_gemessen	mg/L	135.720	136.190
	Masse an N	**mg**	**33.905**	**34.022**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.080	0.272
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.535	-2.353
	Entnahme_Masse	mg	1.493	1.498
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	34.121	34.233
84	β_gemessen	mg/L	136.370	136.110
	Masse an N	**mg**	**34.067**	**34.002**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-0.054	-0.231
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-0.581	-2.552
	Entnahme_Masse	mg	1.500	1.497
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	34.276	34.214
184	β_gemessen	mg/L	127.210	127.080
	Masse an N	**mg**	**31.779**	**31.747**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.497	-2.468
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-2.732	-4.677
	Entnahme_Masse	mg	1.399	1.398
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	32.089	32.058
230	β_gemessen	mg/L	118.400	117.700
	Masse an N	**mg**	**29.578**	**29.403**
	Elimination E(t)_Masse	mg	-2.511	-2.654

	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.894	-6.963
	Entnahme_Masse	mg	1.302	1.295
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	29.985	29.818
275	β_gemessen	mg/L	120.360	120.800
	Masse an N	**mg**	**30.068**	**30.178**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.083	0.360
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.823	-6.653
	Entnahme_Masse	mg	1.324	1.329
	Zugabe_Masse	mg	1.709	1.709
	Masse_nachBefüllung	mg	30.453	30.558
365	β_gemessen	mg/L	123.700	123.140
	Masse an N	**mg**	**30.902**	**30.762**
	Elimination E(t)_Masse	mg	0.449	0.204
	Elimination E(t)_Konz.	mg/kg N	-4.436	-6.477